

# Table des Matières

Introduction générale .....	i
-----------------------------	---

## Chapitre I :

<b>Étude des Propriétés électroniques des matériaux et des hétéro-structures à base d'Antimoniures III-Sb .....</b>	<b>1</b>
---	----------

I.1. Introduction.....	2
------------------------	---

I.2. Étude des composés binaires et des alliages ternaires à base d'Antimoniures III-Sb .....	3
---	---

I.3. Étude des propriétés des alliages quaternaires Arséniures d'Antimoniures du type (III/III')-(As/Sb): $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$ et $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ .....	8
--	---

I.3.1. Étude des propriétés de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$ .....	9
---	---

I.3.2. Étude des propriétés de l'alliage $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ .....	12
---	----

I.4. Étude des propriétés des alliages quaternaires Arséniures d'Antimoniures du type (III/III'/III'')-(As/Sb): $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ .....	14
--	----

I.4.1. Étude de la structure de bande .....	14
---	----

I.4.2. Étude de l'accord de maille avec le substrat de GaSb.....	15
--	----

I.5. Étude des propriétés des hétéro-structures à base d'Antimoniures .....	16
---	----

I.5.1. Étude du désalignement de bande à l'interface ou "band-offset" .....	17
---	----

I.5.2. Étude des effets de contrainte due au désaccord de maille.....	17
---	----

I.6. Conclusion .....	20
-----------------------	----

## Chapitre II:

<b>Étude d'optimisation de lasers de type I à puits quantiques d'alliages Arséniures d'Antimoniures quaternaires/quaternaires: <math>Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}</math> ...</b>	<b>23</b>
---	-----------

II.1. Introduction .....	24
--------------------------	----

II.2. Applications des lasers inter-bandes dans le moyen infrarouge .....	25
---	----

II.3. Étude du principe de fonctionnement des lasers inter-bandes .....	29
---	----

II.4. Étude des différents types de lasers inter-bandes.....	29
--	----

II.5. Étude de la structure laser .....	36
---	----

II.6. Étude d'optimisation des paramètres du laser de type I à base de l'hétérostructure	
--	--

quaternaire/quinaire $Ga_{1-x}In_xAs_ySb_{1-y}/ Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ .....	40
II.6.a. Calculs de la longueur d'onde d'émission laser .....	40
II.6.b. Calculs de la densité de courant de seuil du laser .....	44
II.6.c. Calculs du gain laser.....	48
II.7. Conclusion.....	49

### **Chapitre III :**

#### **Étude d'optimisation des lasers de type I à puits quantiques d'alliages Nitrures d'Antimoniures quaternaires/quaternaires : $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}/ Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ .... 53**

III.1. Introduction .....	54
III.2. Étude des propriétés des Nitrures d'Antimoniures .....	55
III.2.1. Étude des propriétés structurales .....	55
III.2.2. Étude des propriétés électroniques.....	56
III.2.3. Étude des propriétés de l'alliage $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}$ .....	58
III.2.4. Étude des propriétés de l'alliage $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ .....	61
III.2.5. Étude des propriétés de l'hétéro-structure $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y} / Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ .....	63
III.3. Étude d'optimisation du laser type I à base de $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}/ Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ .....	68
III.3.1. Calculs de la longueur d'onde d'émission laser .....	68
III.3.2. Gain optique et densité de courant de seuil .....	69
III.4. Conclusion.....	71

### **Chapitre IV :**

#### **Étude d'optimisation des lasers de type II ou Lasers à Cascade Quantique à transition inter-sous-bandes à base de $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/ Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ ..... 73**

IV.1. Introduction.....	74
IV.2. Étude des Lasers à Cascade Quantique .....	75
IV.2.1. État de l'art sur les Lasers à Cascade Quantique .....	76
IV.2.2. Principe de fonctionnement des lasers intra-bandes .....	76
IV.2.3. Applications des LCQ dans le domaine du THz .....	78
IV.3. Transition inter-sous-bandes dans un Puits Quantique.....	81
IV.3.1. Les états électroniques .....	81
IV.3.2. Règles de sélection.....	82

IV.3.3. Taux de transitions (spontanée et stimulée) .....	83
IV.4. Émission inter-sous-bandes .....	85
IV.4.1. Conditions pour obtenir une inversion de population .....	85
IV.5. Optimisation de la structure laser à cascade quantique .....	88
IV.5.1. Structure du LCQ.....	88
IV.5.3. Gain max du laser .....	91
IV.5.4. Densité de courant de seuil .....	95
IV.5.4. Gain du laser .....	96
IV.6. Conclusion .....	97
<b>Chapitre V :</b>	
<b>Étude comparative des Effets de la non-parabolicité sur les propriétés des lasers de type I et de type II .....</b>	
<b>101</b>	
V.1. Introduction .....	102
V.2. Modèle k.P basé sur l'Hamiltonien [8x8] de Luttinger-Kohn .....	103
V.3. Formalisme de Pikus-Bir.....	105
V.4. Masse effective non-parabolique de conduction.....	106
V.5. Masse effective non-parabolique de valence .....	107
V.6. Application aux lasers de type I à base de $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ .....	107
V.6.1. Masses effectives non-paraboliques de conduction et de valence .....	107
V.6.2. Influence de la concentration en arsenic sur les masses effectives.....	109
V.6.3. Influence de la non-parabolicité sur le gain max .....	111
V.7. Application aux LCQ à base de $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ .....	114
V.7.1. Effet de contrainte et de non-parabolicité sur la masse effective de conduction .....	114
V.7.2. Effet de contrainte et de non-parabolicité sur la force d'oscillateur .....	117
V.7.3. Effet de contrainte et de non-parabolicité sur le temps de transit.....	119
V.7.4. Effet de contrainte et de non-parabolicité sur le gain optique .....	121
V.8. Conclusion.....	123
<b>Conclusion générale .....</b>	<b>126</b>

## Introduction générale

---

Les semi-conducteurs de la famille des antimoniures présentent un très grand potentiel pour la réalisation de nombreux types de composants optoélectroniques : les émetteurs, les détecteurs, les capteurs et les photopiles solaires.

Parmi les applications les plus importantes de ces matériaux et qui nous intéressent dans ce travail, il y a les lasers émettant dans la gamme du moyen infrarouge ou Mid Infra-Red (MIR) couvrant le domaine de longueurs d'ondes dans l'intervalle  $2\mu\text{m}$ - $10\mu\text{m}$ . Cette gamme de longueurs est très intéressante pour de nombreuses applications dans de nombreux domaines [1,2], tels que les télécommunications et télédétections spatiales civiles et militaires, le guidage et contrôle par lasers, les télémessures/spectroscopies et contrôle de l'environnement, détection de gaz, dans l'industrie et dans le secteur médical.

Ces applications ont besoin de sources fiables, sélectives et d'une grande sensibilité i.e. le laser doit être capable de fonctionner dans la gamme la plus large possible de l'infrarouge moyen (Medium Infra-Red ou MIR) correspondant au domaine  $2\mu\text{m} < \lambda < 10\mu\text{m}$  et du THz (Téra-Hertz) correspondant au domaine  $30\mu\text{m} < \lambda < 300\mu\text{m}$ , avec de bonnes propriétés du faisceau laser, en termes de puissance, de modes laser, de mono-chromaticité, de directivité et de cohérence.

Il existe deux types principaux de lasers à semi-conducteurs et à puits quantiques :

➤ Les lasers de type I à transition **inter-bandes** à Multi-Puits Quantiques (MPQ): ces lasers fonctionnent sur des hétérostructures de type I, basés sur des transitions optiques directes par la recombinaison d'un électron de la bande de conduction à un trou de la bande de valence. Ces lasers sont capables de fonctionner en régime continu à température ambiante mais ils sont limités à  $\lambda \leq 3.3\mu\text{m}$  [3-5] à cause principalement du mauvais confinement des trous:  $\Delta E_V \rightarrow 0$  (transition type I-type II) quand  $\lambda > 3.3\mu\text{m}$  et de l'effet Auger qui devient de plus en plus important quand la longueur d'onde augmente.

➤ Les lasers à transition **inter-sous-bandes** à Cascade Quantique (LCQ) : sont des sources unipolaires qui reposent sur des transitions intra-bande entre les différents états quantiques (sous-bandes) de la bande de conduction d'un super-réseau. Ce sont des systèmes qui sont très difficiles à optimiser théoriquement et très complexes à fabriquer technologiquement. Cependant, ils offrent la possibilité de surmonter de nombreuses limites rencontrées dans les lasers inter-bandes [6], car ils présentent plusieurs avantages :

- Ils sont capables de produire des rayonnements intenses dans toute la gamme de longueurs d'onde du MIR et THz, ce qui permet de détecter les traces d'une substance sondée (particule par milliard) avec une très grande sensibilité et de bonne précision ;
- Très sélectifs et d'une très grande sensibilité ;
- Bonnes propriétés du faisceau: rayonnement très intense, directionnel et monochromatique ;
- Puissance élevée ;
- Fonctionnement en régime pulsé et de courtes durées d'impulsions dans la picoseconde (ps) ce qui permet d'effectuer des mesures spectroscopiques hyperfines.

Ces lasers sont très prometteurs dans les applications dans le Moyen-Infra-Rouge (MIR), l'Infra-rouge Lointain (FIR) de la gamme  $10\mu\text{m} \leq \lambda \leq 30\mu\text{m}$  et dans le THz. Cependant, ils ne fonctionnent le plus souvent qu'à basses températures  $T < 300\text{K}$  [7] à cause de certains inconvénients : limite de puissance, instabilité de fonctionnement, faible durée de vie du laser,...

Dans ce travail, nous allons procéder à une étude théorique comparative des lasers inter-bandes à puits quantiques de type I et des lasers inter-sous-bandes à cascade quantique. Notre objectif étant d'améliorer les performances de ces deux types de lasers. Il s'agit d'optimiser leurs paramètres, en termes de longueur d'onde, de gain optique, de densité de courant de seuil laser et de puissance.

Dans ce contexte, on se propose d'étudier les alliages à antimoniure III-Sb, et en particulier on s'intéresse aux alliages quaternaires et quinaires. Ces alliages permettent d'améliorer les effets de contraintes à l'interface et le confinement des porteurs. Cependant, ils sont caractérisés par un faible gap qui se traduit par toute une série d'effets qui influent sur les propriétés du laser, tel que : forte interaction inter-bandes : entre bandes de conduction et bandes de valence (band mixing) ; la non-parabolicité et la contrainte qui est due au désaccord de maille entre les couches semi-conductrices.

Pour cela, nous allons utiliser le modèle  $k.P$  basé sur l'Hamiltonien [8x8] de Luttinger-Kohn combiné avec le formalisme de Pikus-Bir, afin de prendre en compte tous les effets du confinement quantique : contrainte, le mélange de bande (band-mixing), et la non-parabolicité.

Ce travail de thèse est subdivisé en cinq chapitres :

Au chapitre I, nous étudions les propriétés structurales et électroniques des différents alliages à base d'antimoniures. Nous montrons que l'utilisation de l'alliage quinaire

$\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$  pour la barrière avec le puits  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  permet d'améliorer les performances des lasers tels que le confinement des porteurs.

Au chapitre II, nous procédons à une étude d'optimisation de structures lasers à puits quantiques de type I à base d'hétérostructure Arséniures d'Antimoniures quaternaires/quinaires :  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$ . Il s'agit d'optimiser les paramètres du laser : la longueur d'onde de mission laser, le gain optique et la densité de courant de seuil du laser.

Au chapitre III, nous procédons à une étude d'optimisation d'un autre type de laser basé sur les hétérostructures de type I à base de matériaux dilués nitrures d'antimoniures  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}_y\text{Sb}_{1-y}$ . Nous procédons à un calcul d'optimisation des paramètres du laser en termes de longueur d'onde de mission laser, de gain optique et de la densité de courant de seuil du laser.

Au chapitre IV, nous procédons à une étude d'optimisation d'un laser à cascade quantique (LCQ) basé sur les transitions inter-sous-bandes du système à super-réseaux  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$ . Il s'agit d'optimiser la structure du laser, nous devons choisir les bonnes compositions d'alliages, la meilleure conception ainsi que la bonne structure, afin d'améliorer la longueur d'onde d'émission, augmenter le gain optique et réduire le courant de seuil du laser.

Au chapitre V, nous étudions les effets de contrainte et de non-parabolicité sur les propriétés des lasers. Nous montrons une influence importante de la contrainte et de non-parabolicité d'une part sur les paramètres du laser inter-bande à puits quantiques et d'autre part sur les propriétés du laser intra-bande à cascade quantique à base de  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$ .

## Références

---

- [1] S. Welzel, S. Stepanov, J. Meichsner and J. Röpcke, Journal of Physics, 012010, Conference Series **157**, (2009).
- [2] G. Wysocki; A. A. Kosterev, F. K. Tittel, Applied physics. B, **80**, n°4-5, pp. 617-625, (2005).
- [3] K. Zitouni, A. Kadri, P. Christol, A. Joullié, Institute of physics Conference Series N°**187**, Narrow Gap Semiconductors 2005, edited by J. Kono and J. Léotin, pp. 351-356, (2005)
- [4] A. Kadri, K. Zitouni, Y. Rouillard, P. Christol Springer Series in Physics **119**, p. 135, (2008)
- [5] T. Hosoda, G. Belenky, L. Shterengas, G. Kipshidze, and M. V. Kisin, Appl. Phys. Lett., **92**, 091106, (2008).
- [6] D. Chastanet, G. Lollia, A. Bousseksou, M. Bahriz, 2 P. Laffaille, A. N. Baranov, F. Julien, R. Colombelli, R. Teissier, Applied Physics Letters, **104**, 021106, (2014)
- [7] Y. V. Flores, S. S. Kurlov, M. Elagin, M. P. Semtsiv and W. T. Masselink, Appl. Phys. Lett. **103**, 161102, (2013).

## Chapitre I

# Étude des propriétés électroniques des matériaux et des hétéro-structures à base d'Antimoniures III-Sb

I.1. Introduction .....	2
I.2. Étude des composés binaires et des alliages ternaires à base d'Antimoniures III-Sb .....	3
I.3. Étude des propriétés des alliages quaternaires Arséniures d'Antimoniures du type (III/III')-(As/Sb): $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$ et $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ .....	8
I.3.1. Étude des propriétés de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$ .....	9
I.3.2. Étude des propriétés de l'alliage $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ .....	12
I.4. Étude des propriétés des alliages quaternaires Arséniures d'Antimoniures du type (III/III'/III'')-(As/Sb): $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ .....	14
I.4.1. Étude de la structure de bande .....	14
I.4.2. Étude de l'accord de maille avec le substrat de GaSb .....	15
I.5. Étude des propriétés des hétéro-structures à base d'Antimoniures .....	16
I.5.1. Étude du désalignement de bande à l'interface ou "band-offset" .....	17
I.5.2. Étude des effets de contrainte due au désaccord de maille .....	17
I.6. Conclusion .....	20

Clicours.COM

## I.1. Introduction :

Les antimoniures sont formés par les matériaux semi-conducteurs composés binaires III-Sb tels que AlSb, GaSb, InSb ainsi que leurs alliages associés ternaires, quaternaires et quinaires. Ces matériaux sont caractérisés par de faibles gaps ( $0.18\text{eV} < E_G < 1.5\text{eV}$ ) centrés autour de celui de GaSb ( $E_G=0.7\text{eV}$ ) et de faibles masses effectives des électrons et des trous. Ils sont ainsi très adaptés pour réaliser des lasers émettant à température ambiante dans le domaine du moyen infrarouge  $2\mu\text{m}-10\mu\text{m}$  [1]. Utilisés d'abord dans les diodes lasers à puits quantique [2], ces composés offrent des solutions innovantes et performantes pour réaliser des lasers à cascade quantique [3-5].

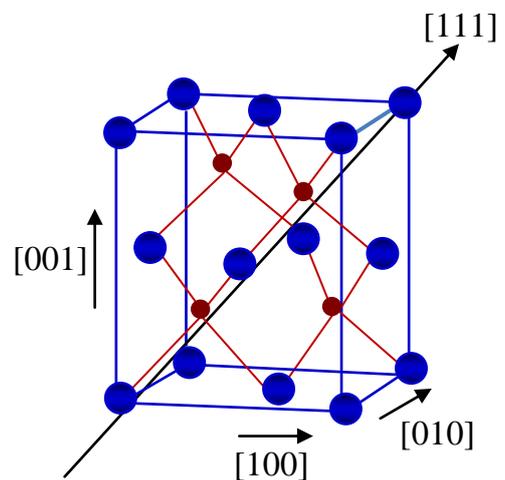
Pour atteindre la longueur d'onde désirée, on doit choisir les bonnes compositions du matériau utilisé pour le puits pour obtenir les énergies de la bande interdite ( $E_G$ ) correspondantes. On doit également choisir les bonnes compositions du matériau utilisé pour la barrière pour avoir un bon accord de maille ou un désaccord de maille inférieure à 2%. Pour éviter la fuite des porteurs on doit avoir un bon confinement des

électrons et des trous. Dans ce chapitre, nous faisons une optimisation de tous ces paramètres en étudiant les propriétés de bandes des différents alliages et hétéro-structures à base d'Antimoniure. Nous déterminons l'énergie de la bande interdite en fonction de la composition d'alliage, nous étudions l'effet de la barrière quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  sur le puits  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  et l'effet de la barrière quinaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$  sur le même puits  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ . Nous déterminons le band offset de ces hétéro-structures et nous étudions enfin la contrainte puits/barrière dans le cas de l'hétéro-structure quaternaire/quaternaire et dans le cas de l'hétéro-structure quaternaire/quinaire.

## I.2. Étude des composés binaires et alliages ternaires d'Antimoniures III-Sb

### I.2.1. Propriétés structurales

Les composés binaires III-Sb se cristallisent suivant la structure cubique de type **Zinc blende** qui est formée par deux sous réseaux cubiques faces centrées décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de la diagonale principale du cube, un de ces sous réseaux est constitué d'atomes de la colonne III alors que l'autre est constitué d'atomes de la colonne V (atomes d'Antimoine). Figure I.1



**Figure I.1** : Structure cristalline du Zinc blende

### I.2.2. Propriétés électroniques:

Pour définir les propriétés électroniques d'un semi-conducteur, il est nécessaire de connaître sa structure de bande qui est représentée dans l'espace réciproque suivant les différentes directions du vecteur d'onde  $\vec{k}$ . La **zone de Brillouin** pour une structure cubique est représentée suivant la figure I.2. Cette cellule élémentaire du réseau réciproque possède plusieurs directions de haute symétrie. Le voisinage de  $\Gamma$  décrit le centre de zone alors que celui de X ou L indique un bord de zone.

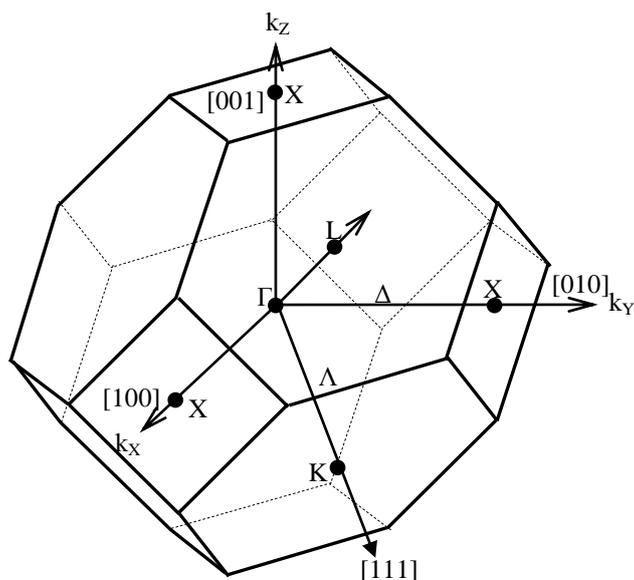


Figure I.2: Première zone de Brillouin d'un cristal cubique

➤ Structure de bande d'énergie des semi-conducteurs III-Sb

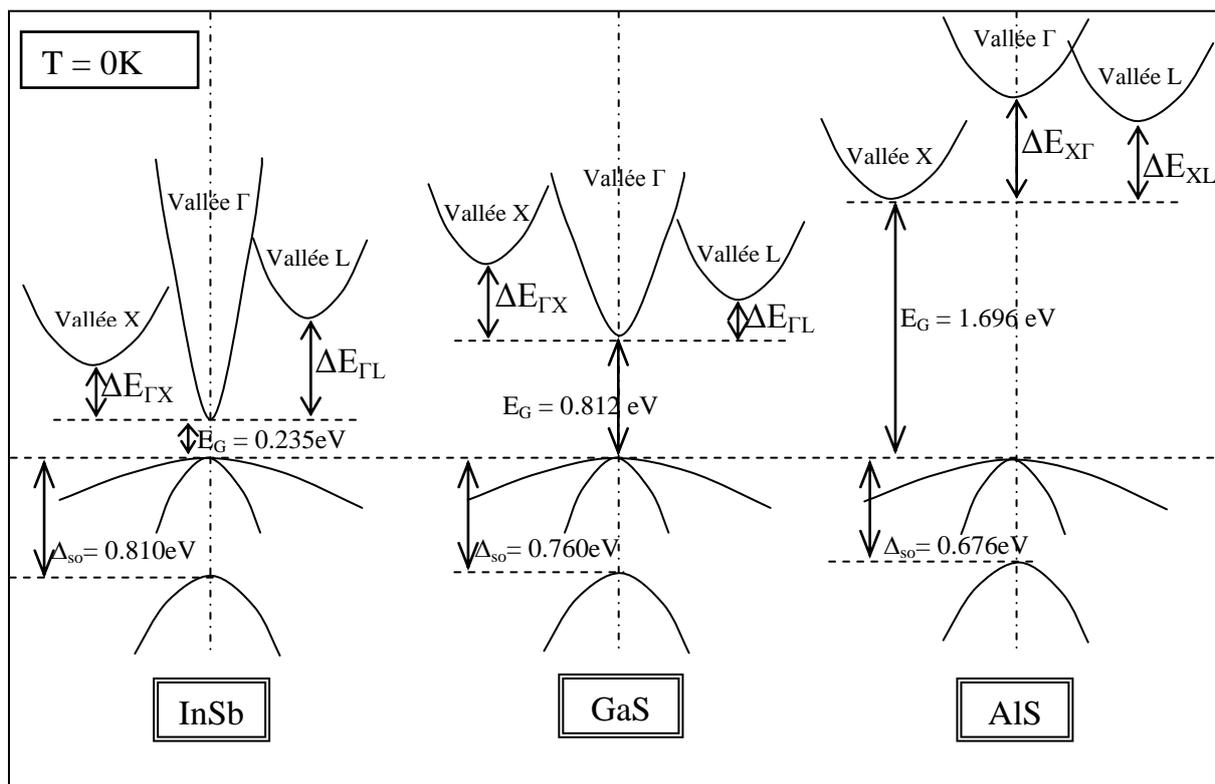


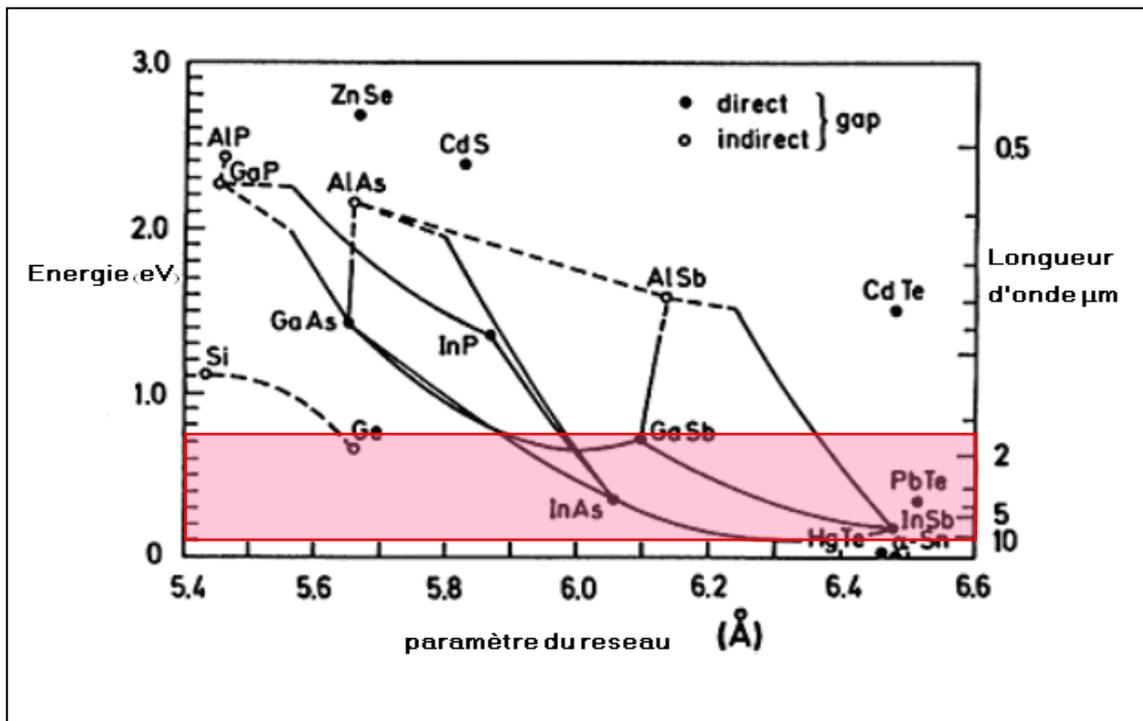
Figure I.3: Structure de bande des composés binaires à base d'Antimoniures

La figure I.3 montre la structure de bande d'énergie des composés binaires à base d'Antimoniures. Les composés *GaSb*, *InSb* sont caractérisés par un **gap direct**, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction coïncident au point  $\Gamma$  (en  $\mathbf{k} = 0$ ). Par contre, le composé *AlSb* possède un **gap indirect** car le maximum de la bande de valence est situé au point  $\Gamma$  et le minimum de la bande de conduction est au point X dans la direction (100).

**Tableau I.1 : Les paramètres physiques des composés binaires III-V à 300K [6]**

	AlSb	GaSb	InSb	AlAs	GaAs	InAs
a (Å)	6.136	6.096	6.479	5.661	5.653	6.058
$E_G^\Gamma$ (eV)	2.300	0.727	0.174	3.003	1.423	0.354
$E_G^X$ (eV)	1.616	1.033	0.569	2.164	1.899	1.370
$E_G^L$ (eV)	2.210	0.753	0.869	2.352	1.707	1.070
$\Delta_{SO}$ (eV)	0.590	0.675	0.749	0.184	0.245	0.327
$m_e^*$ ( $m_0$ )	0.135	0.035	0.010	0.145	0.063	0.022
$m_{LH}^*$ ( $m_0$ )	0.105	0.037	0.013	0.160	0.078	0.023
$m_{HH}^*$ ( $m_0$ )	0.465	0.342	0.321	0.673	0.489	0.371
$m_{SO}^*$ ( $m_0$ )	0.192	0.107	0.102	0.184	0.124	0.117
$C_{11}$ (GPa)	876.9	884.2	684.7	1250	1221	832.9
$C_{12}$ (GPa)	434.1	402.6	373.5	534	566	452.6
$C_{44}$ (GPa)	407.6	432.2	311.1	542	600	395.9
$a_C$ (eV)	-4.5	-7.5	-6.94	-5.64	-7.17	-5.08
$a_V$ (eV)	-1.4	-0.8	-0.36	-2.47	-1.16	-1.00
b(eV)	-1.35	-2.00	-2.00	-2.30	-2.00	-1.80
$\alpha$ (MeV/K)	0.420	0.417	0.320	0.885	0.541	0.276
B (K)	140	140	170	530	204	93
$\gamma_1$	5.180	13.400	34.800	3.76	6.980	20.000
$\gamma_2$	1.190	4.700	15.500	0.82	2.060	8.500
$\gamma_3$	1.970	6.000	16.500	1.42	2.930	9.200

Sur la figure I.4, nous montrons la variation de l'énergie de la bande interdite ( $E_G$ ) en fonction du paramètre de maille des différents semi-conducteurs qui peuvent être utilisés pour la conception des lasers émettant dans le domaine du moyen infrarouge.



**Figure I.4 :** Largeur de la bande interdite en fonction du paramètre de maille des différents alliages.

À partir de cette figure, on distingue trois filières de matériaux qui peuvent servir à la réalisation des lasers émettant dans le moyen infrarouge et l'infrarouge lointain.

➤ Filière des matériaux II-VI (HgCdTe) :

Les matériaux II-VI à base de HgCdTe, caractérisés par un petit gap, ont été très bien étudiés pour la réalisation des photo-détecteurs et des lasers dans le moyen infrarouge et dans l'infrarouge lointain. Cependant, à cause de l'instabilité chimique de l'alliage HgCdTe qui est due à l'évaporation du Mercure à très faible température, il est très difficile à fabriquer ce type de laser à température ambiante. Un fonctionnement d'un laser à base de HgCdTe a été démontré pour une émission à  $\lambda=5.3\mu\text{m}$  en mode pulsé à 60K [7].

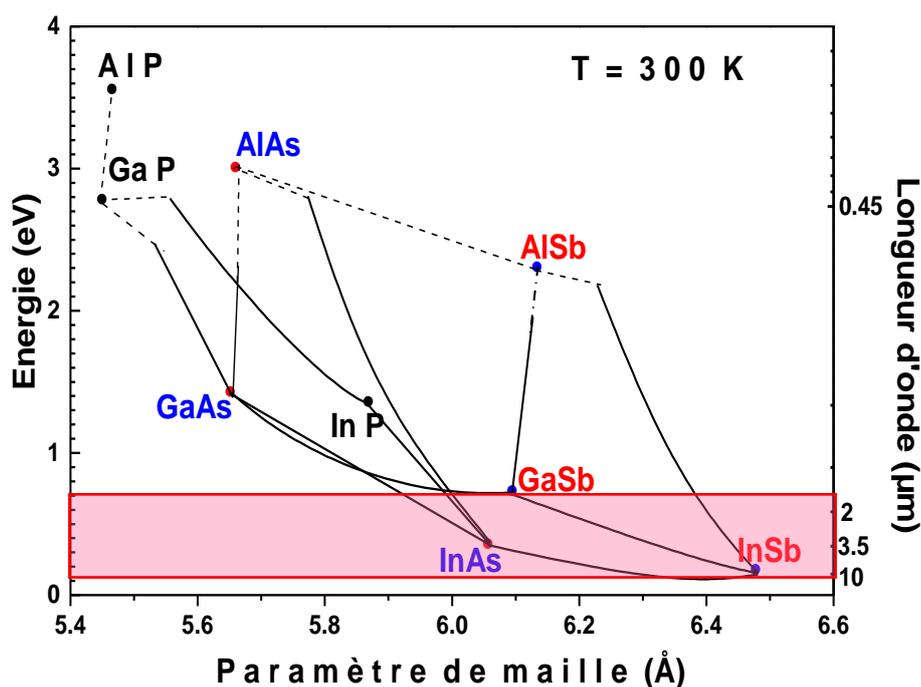
➤ Filière des matériaux IV-VI (PbSnTe):

Les lasers aux sels de Plomb de la filière IV-VI, comprenant les binaires PbTe, PbSe, PbS et les alliages associés à partir des composés SnSe, SnTe et CdS permettent de couvrir un large domaine spectral qui peut atteindre l'infrarouge lointain [8].

Les lasers aux sels de Plomb sont très bien adaptés en spectroscopie. Cependant, leurs performances se dégradent rapidement à grande longueur d'onde, car leur fonctionnement est limité à des températures cryogéniques [8]. De plus, il n'est pas évident de les fabriquer en super-réseau, la technologie de croissance de ces matériaux ne permet de les réaliser qu'en couches minces.

➤ Filière des matériaux III-V (Arséniures, Antimoniures):

Les composés III-V notamment les Antimoniures de la filière III-Sb qui comprennent toute une série d'alliages binaires, ternaires, quaternaires et quinaires, permettent de couvrir un large domaine de longueurs d'onde dans le moyen infrarouge (figure I.5).



*Figure I.5 : Largeur de la bande interdite en fonction du paramètre de maille des différents alliages III-V.*

Les lasers à puits quantiques à base d'alliages ternaires  $Ga_xIn_{1-x}Sb/A_xIn_{1-x}Sb$  permettent l'émission à des longueurs d'onde comprises entre 3 µm et 4 µm à

température ambiante à [9]. Les lasers de type I à base d'alliages quaternaires  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$  permettent de couvrir la gamme de longueur d'onde jusqu'à 2.8  $\mu m$  [10], et les hétéro-structures à base de l'alliage quinaire  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ , peuvent atteindre 3.2  $\mu m$  pour un fonctionnement en régime continu à température ambiante [11].

➤ **Les alliages ternaires :**

Un alliage ternaire ( $A_xB_{1-x}C$ ) est formé de deux composés binaires  $(AC)_x$  et  $(BC)_{1-x}$ . Où x désigne la composition d'alliage. La variation de l'énergie de la bande interdite ( $E_G$ ) des alliages ternaires est calculée à partir de la relation de Végard (I.1).

$$E_G(A_{1-x}B_xC) = (1-x)E_G(AC) + xE_G(BC) - x(1-x)c \quad [eV] \quad (I.1)$$

c : est le coefficient de courbure (bowing parameter). On donne le coefficient de courbure des alliages ternaires suivant le tableau I.2.

Les paramètres énergétiques des alliages ternaires peuvent ainsi être ajustés en jouant sur un seul paramètre x. En particulier, on peut ainsi ajuster la longueur d'onde du rayonnement émis en choisissant la bonne composition d'alliage. Cependant, on ne contrôle pas le paramètre de maille et donc la contrainte induite par son désaccord.

**Tableau I.2 : Le coefficient de courbure des composés ternaires [6]**

Arséniures	c (e.V)	Antimoniures	c (e.V)	Arséniures d'antimoniures	c (e.V)
$Al_xGa_{1-x}As$	$-0.127 + 1.310x$	$Al_xGa_{1-x}Sb$	$-0.044 + 1.220x$	$AlAs_xSb_{1-x}$	0.800
$Ga_xIn_{1-x}As$	0.477	$Ga_xIn_{1-x}Sb$	0.415	$GaAs_xSb_{1-x}$	1.430
$Al_xIn_{1-x}As$	0.70	$Al_xIn_{1-x}Sb$	0.430	$InAs_xSb_{1-x}$	0.670

**I.3. Étude des propriétés des alliages quaternaires Arséniures d'Antimoniures du type (III/III')-(As/Sb):  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$**

Les alliages quaternaires de type I de la forme III-III'-V-V' sont très utilisés pour la fabrication des lasers dans le moyen infrarouge. Ceci est dû principalement à la possibilité d'ajuster le gap toute en contrôlant la contrainte entre les semi-conducteurs.

Ces alliages sont constitués de deux atomes de la colonne III et deux atomes de la colonne V du tableau périodique. Plusieurs approches ont été élaborés pour l'étude des propriétés de bandes de ces alliages [12-16], l'équation semi-empirique introduite par Glisson et al. est la plus accessible pour étudier les paramètres énergétiques des quaternaires de type I [16]:

$$G''_{ABCD}(x, y) = \frac{x(1-x)[(1-y)G'_{ABD}(x) + yG'_{ABC}(x)] + y(1-y)[xG'_{ACD}(y) + (1-x)G'_{BCD}(y)]}{x((1-x) + y(1-y))} \quad (I.2)$$

Avec:  $G'_{ABD}, G'_{ABC}, G'_{ACD}, G'_{BCD}$  sont les paramètres énergétiques des alliages ternaires  $A_xB_{1-x}C, A_xB_{1-x}D, A_xC_{1-x}D, B_xC_{1-x}D$

### I.3.1. Étude des propriétés de l'alliage $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$

➤ Étude de la structure de bande

L'alliage quaternaire  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$  est utilisé pour le puits. À partir de l'équation I.2, nous avons déterminé la variation de l'énergie  $E_G$  du puits  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$  qui est représentée suivant la figure I.6.

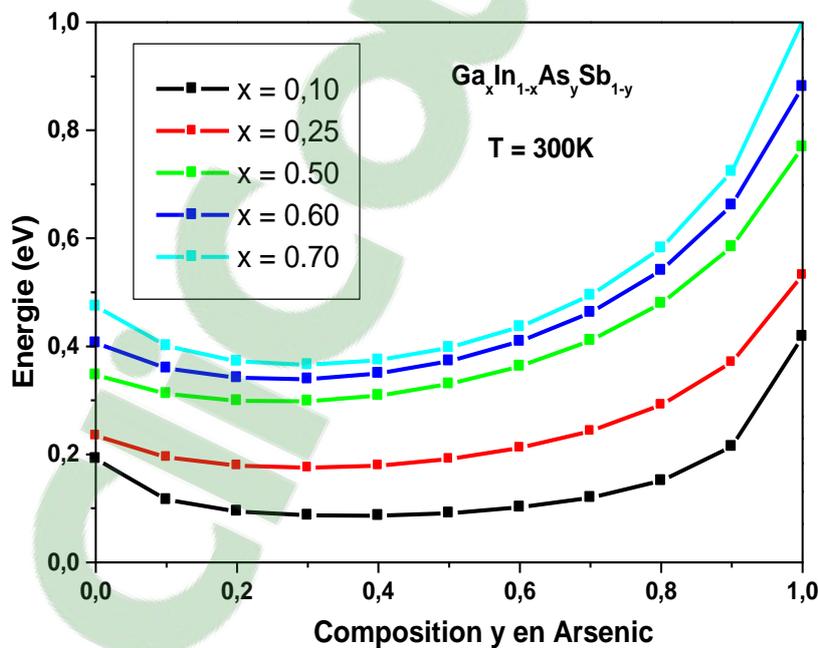


Figure I.6: Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la composition y en Arsenic de l'alliage  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$

À partir de cette figure, on remarque que : L'énergie  $E_G$  de l'alliage quaternaire  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$  peut être ajustée en jouant sur les deux compositions d'alliage  $x$  et  $y$ .

L'énergie  $E_G$  de l'alliage  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$  en fonction de la composition en Arsenic présente une forte courbure de bande (fort bowing) qui est dû au fait que la combinaison de plusieurs éléments chimiques se traduit par une perturbation des atomes du réseau, déformation de la maille et déformation de la structure et donc on aura un désordre d'alliage : certaines compositions d'alliage ne sont pas accessibles chimiquement. Donc, le matériau peut être fabriqué pour les faibles concentrations en As ( $0 \leq y \leq 30\%$ ) et pour les fortes concentrations en arsenic ( $80\% \leq y \leq 100\%$ ).

On remarque aussi que : plus on augmente la concentration en gallium, plus l'énergie  $E_G$  augmente et la longueur d'onde diminue.

Donc, on joue sur les deux compositions d'alliage ( $x$  et  $y$ ), on balaye une large gamme de longueurs d'onde du moyen infrarouge.

➤ Étude de l'accord de maille avec le substrat

Pour les matériaux à antimoniures, le composé binaire GaSb est le mieux adapté comme substrat par rapport aux composés InSb et AlSb qui présente l'inconvénient d'être chimiquement instables (ils s'oxydent). GaSb possède plusieurs propriétés:

- Meilleure qualité cristalline ;
- Facile à purifier ;
- Stable chimiquement ;
- Bonne conductibilité thermique.

La variation de l'accord de maille avec le substrat est donnée par cette équation:

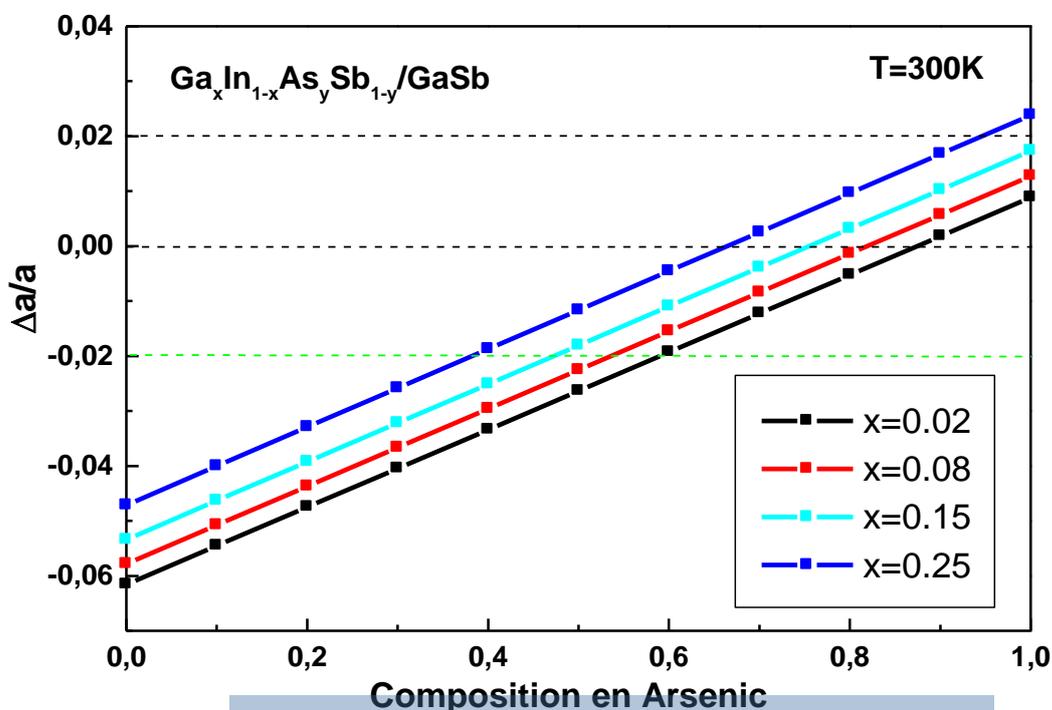
$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{a_{\text{Substrat}} - a_{\text{matériau}}}{a_{\text{Substrat}}} \quad (\text{I.3})$$

Le paramètre de maille des matériaux est considéré comme étant une variation linéaire suivant la loi de Végard (Tableau I.3)

**Tableau I.3 : Variation à 300K du paramètre de maille des alliages III-Sb**

Les alliages		$a(x)$ [Å]
Ternaires	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	$(1-x) 5.653 + x 5.661$
	$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$	$(1-x) 6.058 + x 5.653$
	$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$	$(1-x) 6.479 + x 6.096$
	$\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$	$(1-x) 6.479 + x 6.136$
	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$	$(1-x) 6.096 + x 6.136$
	$\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$	$(1-x) 6.096 + x 5.653$
	$\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}$	$(1-x) 6.479 + x 6.058$
	$\text{AlAs}_x\text{Sb}_{1-x}$	$(1-x) 6.136 + x 5.661$
Quaternaires	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$	$xy 5.661 + x(1-y) 6.136 + (1-x)y 5.653 + (1-x)(1-y) 6.096$
	$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$	$xy 5.653 + x(1-y) 6.096 + (1-x)y 6.058 + (1-x)(1-y) 6.479$
Quinaire	$\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$	$xz 5.661 + x(1-z) 6.136 + yz 5.653 + y(1-z) 6.096 + (1-x-y)z 6.058 + (1-x-y)(1-z) 6.479$

La variation de l'accord de maille avec le substrat pour l'alliage  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  en fonction de la composition  $y$  pour les différentes compositions en Indium, est représentée suivant la figure I.7



**Figure I.7 : Variation de l'accord de maille avec le substrat GaSb de l'alliage  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  à 300K**

D'après la figure I.7, on remarque que l'alliage  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  est aussi bien détendu que comprimé selon la composition d'alliage. Il peut être intéressant pour faire la compensation de la contrainte (strain-compensation).

Le matériau peut être accordé en maille ou en bon accord de maille avec le substrat pour les fortes concentrations en Arsenic.

### I.3.2. Étude des propriétés de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$

➤ Étude de la structure de bande

L'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  est utilisé pour la barrière, l'énergie  $E_G$  de cet alliage est calculée à partir de l'équation I.2. La variation de l'énergie  $E_G$  de l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  en fonction de la composition  $y$  de l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  est représentés sur la figure I.8.

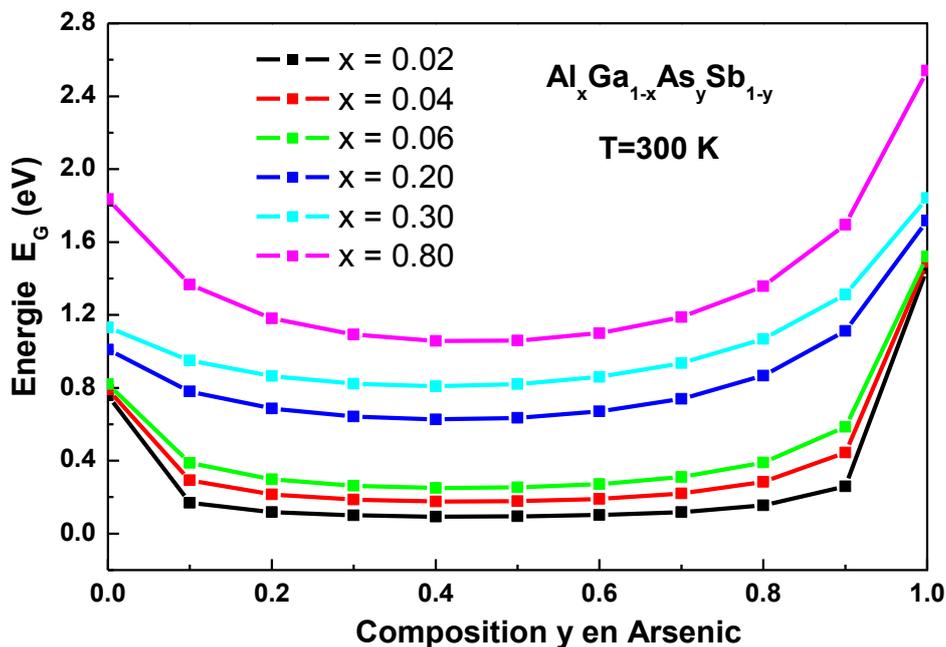


Figure I.8 : Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la composition  $y$  en Arsenic de l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$

La variation de l'énergie  $E_G$  de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$  peut être décomposée en trois zones:

*Zone 1* : Décroissance de l'énergie pour :  $0 \leq y \leq 20\%$  environ en Arsenic.

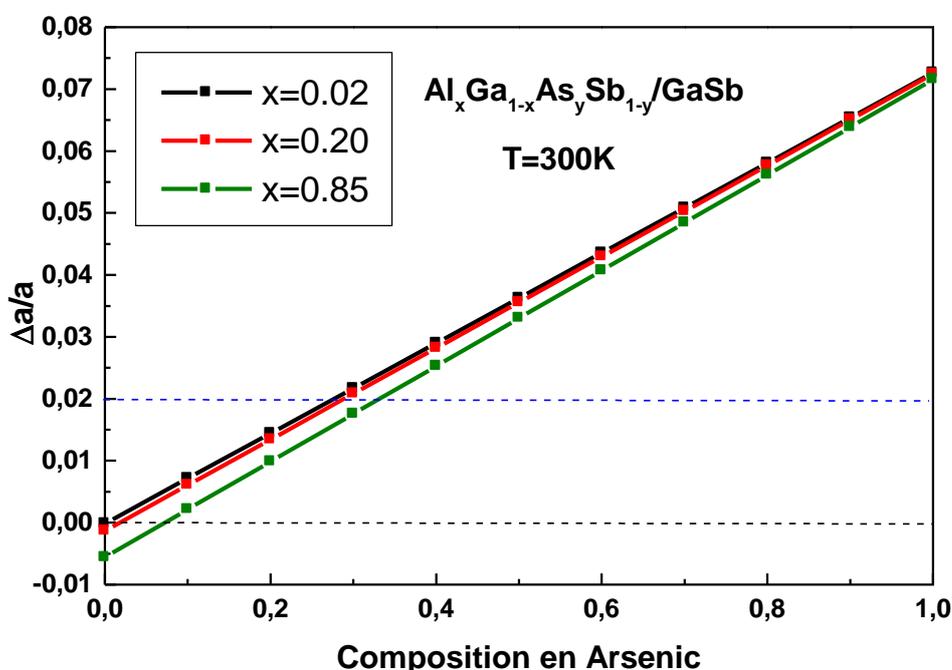
*Zone 2* : La région comprise entre  $20\% < y < 80\%$ , l'énergie  $E_G$  est légèrement constante, ce domaine représente la lacune de miscibilité, c'est un domaine qui est inaccessible chimiquement.

*Zone 3* : Augmentation de l'énergie  $E_G$  lorsqu'on augmente la concentration en Arsenic  $y > 80\%$  environ.

Donc, le matériau peut être fabriqué dans la zone 1 ( $0 \leq y \leq 20\%$  environ en Arsenic) et dans la zone 3 (fortes concentration en Arsenic :  $y > 80\%$  environ). D'autre part, lorsqu'on augmente la concentration en Aluminium, l'énergie de l' $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$  augmente.

➤ Étude de l'accord de maille avec le substrat

La variation de l'accord de maille avec le substrat en fonction de la composition  $y$  pour les différentes compositions en Aluminium, est représentée suivant la figure I.9.



**Figure I.9** : Variation de l'accord de maille avec le substrat GaSb de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$  à 300K

La figure I.9 montre que l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  peut être détendu ou comprimé selon la composition d'alliage. Le matériau est en bon accord de maille avec le substrat ( $\Delta a/a < 2\%$ ) pour les faibles concentrations en Arsenic ( $y < 30\%$ ).

#### **I.4. Étude des propriétés des alliages quinaires Arséniures d'Antimoniures du type (III/III'/III'')-(As/Sb): $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$**

Les alliages quinaires ont été élaborés pour améliorer les effets de contraintes et particulièrement le faible confinement des porteurs rencontrés dans les systèmes quaternaires. L'alliage quinaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$  est utilisé pour la barrière sur le puits  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ . Les paramètres énergétiques du quinaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$  sont calculés à partir d'une variation linéaire plus une variation qui tient compte l'effet du désordre (équation I.4) [17-18].

##### **I.4.1. Étude de la structure de bande**

Nous avons calculé l'énergie de la bande interdite du quinaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$  en fonction de la composition en Arsenic pour différentes compositions en Aluminium et en Gallium (figure I.10).

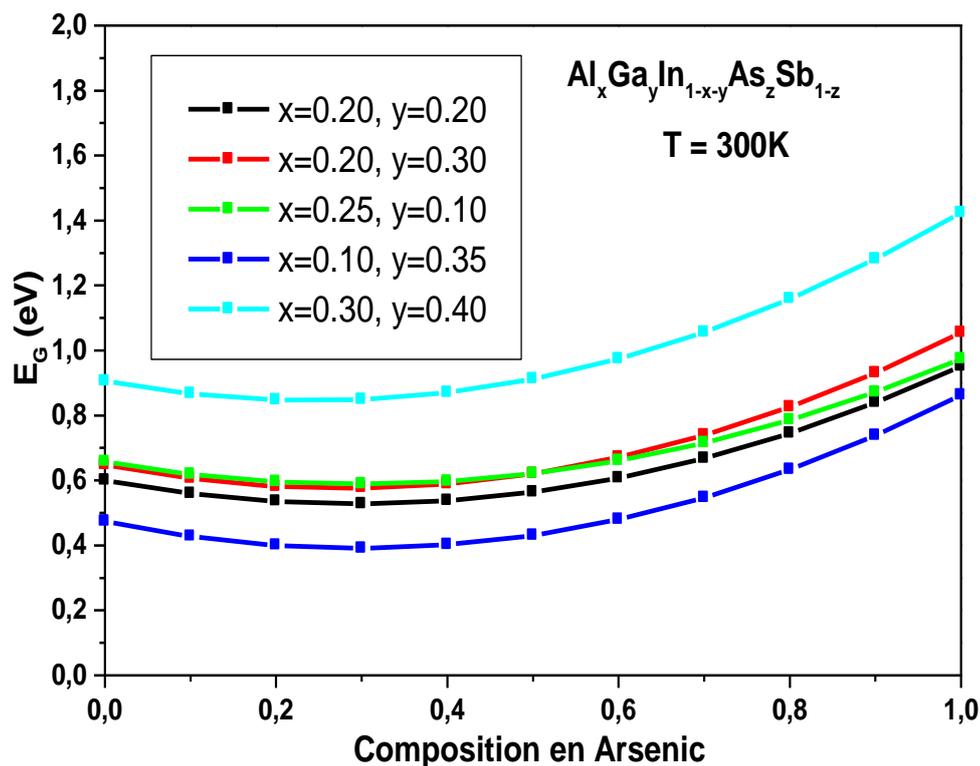


Figure I.10 : Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la composition  $x$ ,  $y$  et  $z$  de l'alliage  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$

Cette figure montre que, lorsqu'on augmente la concentration en Indium ou de Gallium le gap diminue, par contre lorsqu'on augmente la concentration en Arsenic le gap augmente. Donc, par rapport au quaternaire  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$ , le quinaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$  possède trois degrés de flexibilité  $x$ ,  $y$  et  $z$  ce qui permet de faire varier toute une série de paramètres tels que l'énergie  $E_G$  (le gap), le paramètre de maille, les affinités électroniques, en jouant sur les trois compositions d'alliage  $x$ ,  $y$  et  $z$  au lieu deux.

#### I.4.2. Étude de l'accord de maille avec le substrat de GaSb

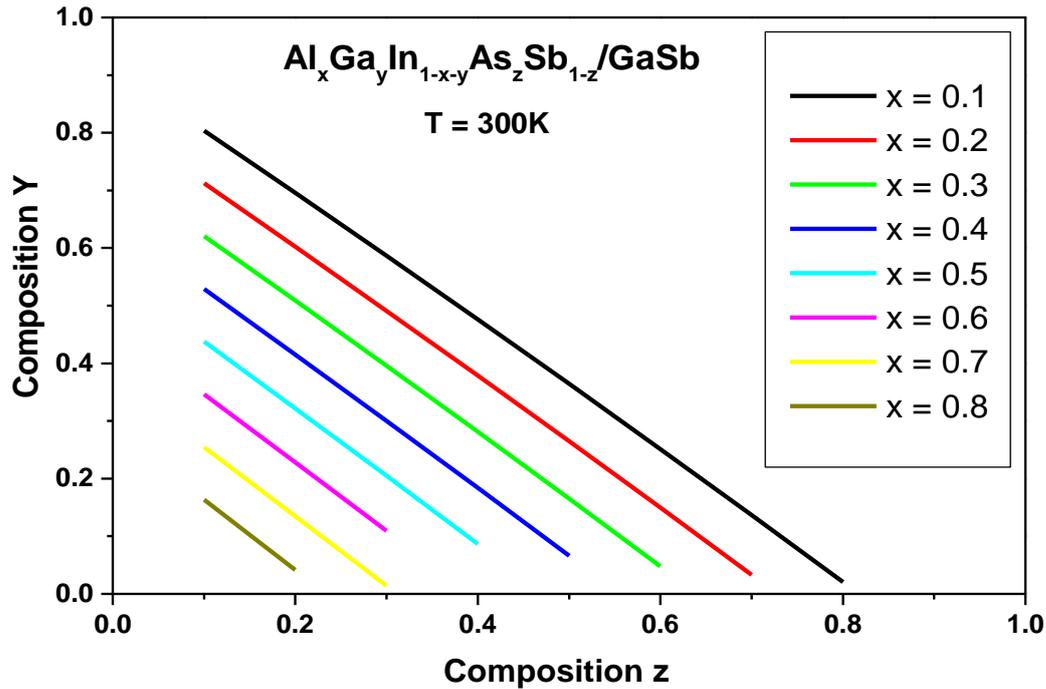
Nous avons étudié l'alliage quinaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$  sur substrat GaSb. La condition de l'accord de maille avec le substrat GaSb est :

$$a(Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}) = a(GaSb)$$

Donc, 
$$y = \frac{6.096 + 0.054xz + 0.343x + 0.421z - 6.479}{0.022z - 0.383} \quad (I.5)$$

Tel que  $0 \leq z \leq 1$  et  $0 \leq x+y \leq 1$

La relation entre la composition  $0 \leq y \leq 1$  en fonction de  $0 \leq z \leq 1$  pour différentes concentration de x en Aluminium est représentée suivant la figure I.11



**Figure I.11** : Relation entre les compositions  $x$ ,  $y$  et  $z$  dans l'alliage  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$  en accord de maille avec le substrat  $GaSb$

### I.5. Étude des propriétés des hétéro-structures à base d'Antimoniures

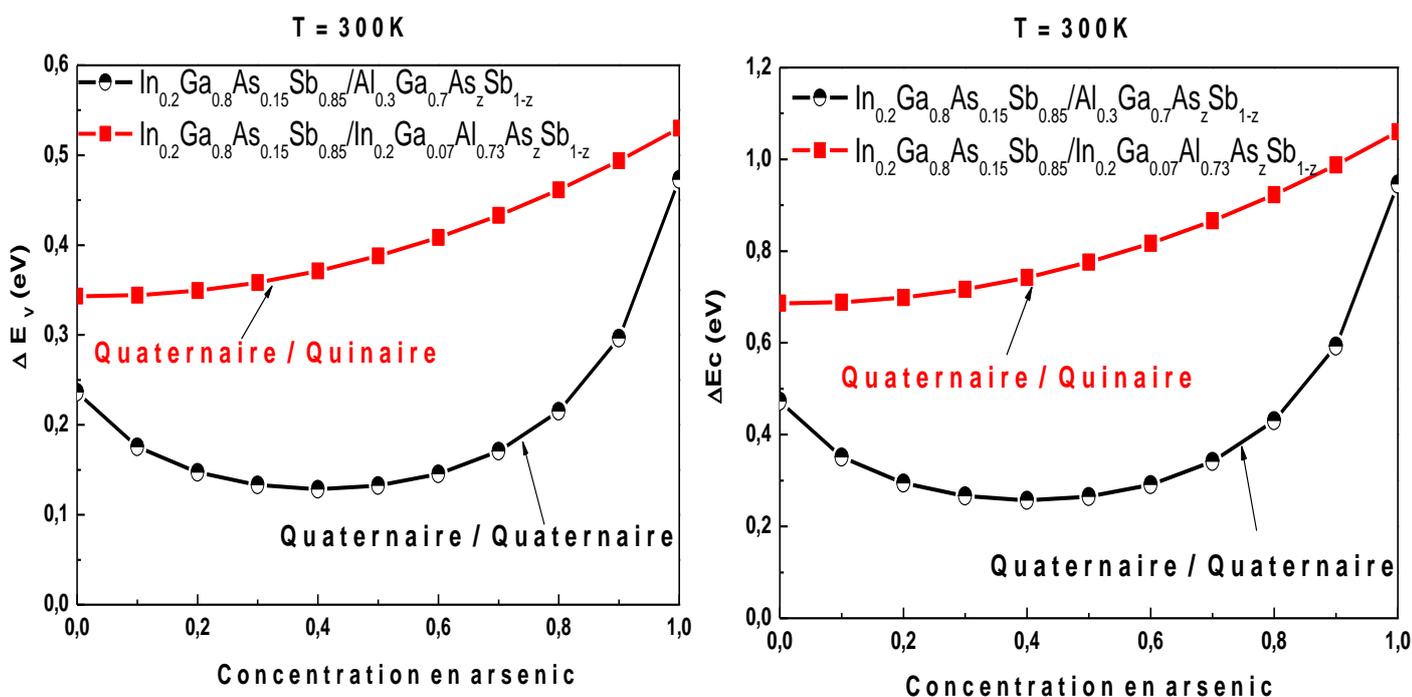
Les hétéro-structures à base d'Antimoniures présentent un réel potentiel pour la réalisation des lasers à semi-conducteurs dans le moyen infrarouge ( $2\mu m-10\mu m$ ).

Actuellement, les lasers qui se basent sur les hétéro-structures de type I les plus performants sont issus à partir des matériaux quaternaires et des alliages quinaires.

Dans cette partie nous faisons une étude comparative de l'hétéro-structure à barrière quinaire :  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$  avec l'hétéro-structure à barrière quaternaire :  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ .

### I.5.1. Étude du désalignement de bande à l'interface ou "band-offset"

En se basant sur la règle d'Anderson [19] i.e.  $\Delta E_C = (2/3) \Delta E_G$  et  $\Delta E_V = (1/3) \Delta E_G$ , nous avons pu déterminer le band offset de l'hétéro-structure dans les 2 cas suivant : - cas où on utilise le quaternaire comme barrière et - cas où on utilise le quinaire comme barrière. Les résultats de ces calculs sont reportés sur les figures I.12(a) et I.12 (b).



**Figure I.12 :** Variation de  $\Delta E_C$  et  $\Delta E_V$  dans le cas de l'hétéro-structure  $In_{0.20}Ga_{0.80}As_{0.15}Sb_{0.85}/Al_{0.3}Ga_{0.7}As_zSb_{1-z}$  et dans le cas de l'hétéro-structure  $In_{0.20}Ga_{0.80}As_{0.15}Sb_{0.85}/In_{0.2}Ga_{0.07}Al_{0.73}As_zSb_{1-z}$

Les figures I.12 (a) et I.12 (b) montrent que le band offset en bande de conduction  $\Delta E_C$  et en bande de valence  $\Delta E_V$  dans le cas du quaternaire/quinaire est beaucoup plus grand que celui dans le cas du quaternaire / quaternaire. Un grand band offset se traduit par un meilleur confinement des porteurs et une diminution du courant de fuite.

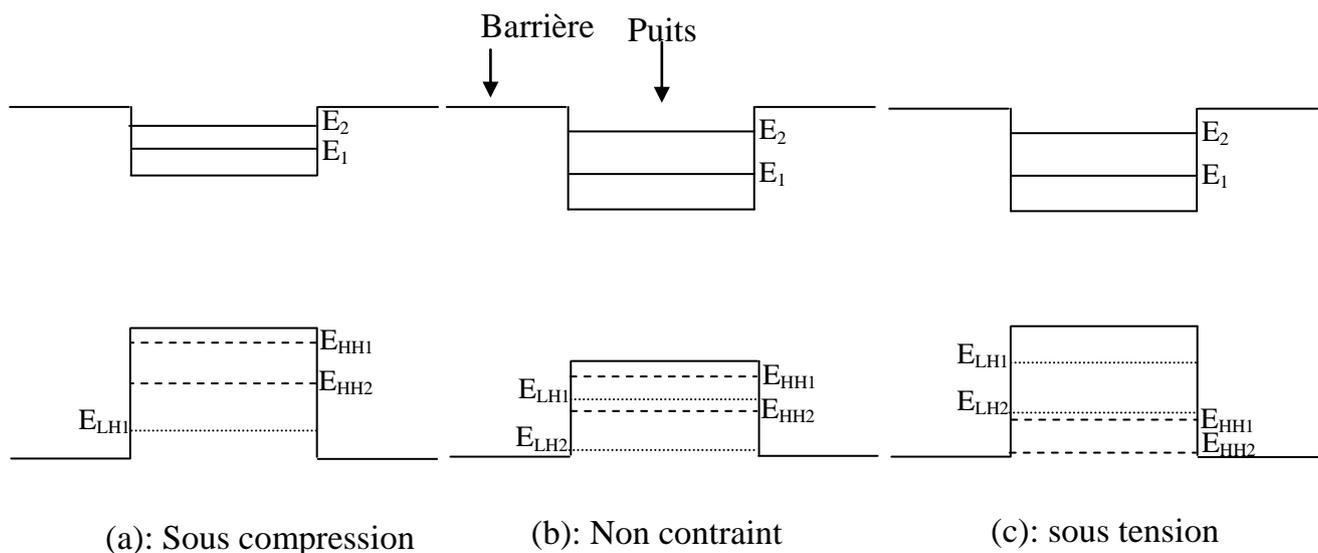
### I.5.2. Étude des effets de contrainte due au désaccord de maille

L'étude de la contrainte est importante pour réaliser de bonnes hétérostructures. Pour éviter les défauts à l'interface, les paramètres de maille des alliages utilisés doivent être proches et le désaccord de maille  $\Delta a/a$  doit être inférieur à 2%. Cependant, la

juxtaposition de plusieurs couches de semi-conducteurs de paramètre de maille différents se traduit par une contrainte mécanique bi-axiale à l'interface des deux matériaux.

On distingue deux types de contraintes [20]:

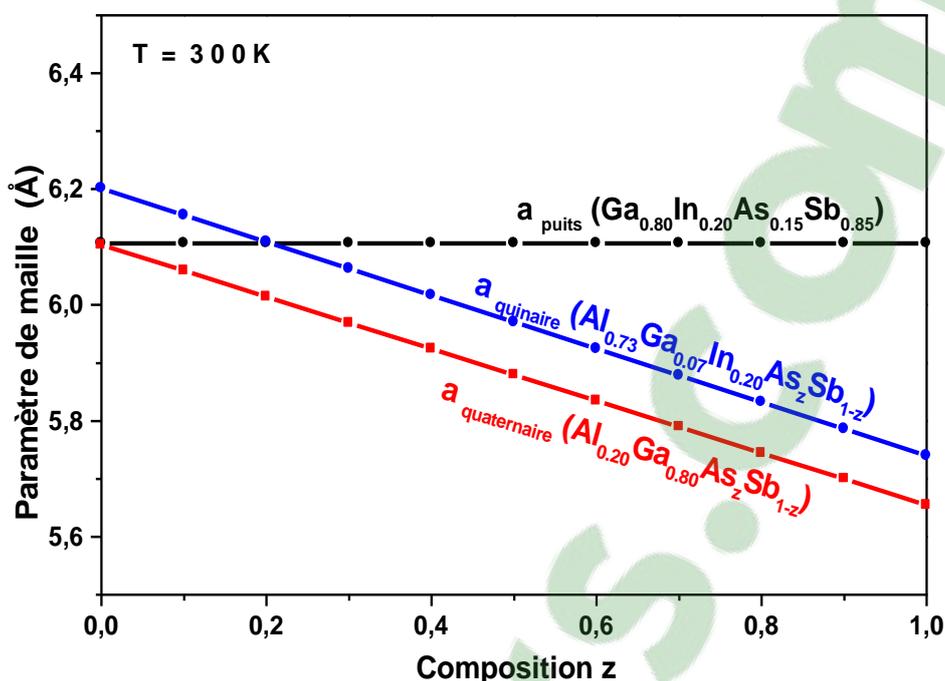
- Contrainte de compression: le puits tend à se comprimer pour s'adapter à la barrière car son paramètre de maille est supérieur à celui de la barrière. Ceci se traduit par un éclatement des niveaux d'énergie et augmentation du gap (Figure I.13)
- Contrainte de tension: elle est due au fait que le paramètre de maille du puits est inférieur à celui de la barrière. Ceci provoque une diminution de gap et inversement des niveaux d'énergie (le niveau des trous lourds  $E_{hh}$  devient au-dessous du niveau des trous légers  $E_{lh}$ ). Figure I.13.



**Figure I. 13:** Effets de la contrainte sur les niveaux d'énergie. (a) puits comprimé, (b) puits non contraint, (c) puits détendu.

En utilisant la loi de Végard, nous avons déterminé le paramètre de maille du puits  $\text{Ga}_{0.80}\text{In}_{0.20}\text{As}_{0.15}\text{Sb}_{0.85}$ , le paramètre de maille de la barrière  $\text{Al}_{0.20}\text{Ga}_{0.80}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$  et le

paramètre de maille du quinaire  $\text{Al}_{0.73}\text{Ga}_{0.07}\text{In}_{0.20}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$ . Les calculs effectués sont reportés sur le tableau I.3 et présentés suivant la figure I.14.



**Figure I.14 :** Variation du paramètre de maille du puits  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ , de la barrière  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  et du quinaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$  en fonction de la composition en Arsenic des barrières.

Sur la figure I.14 nous présentons la variation du paramètre de maille du puits  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ , le paramètre de maille de la barrière  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  et la variation du paramètre de maille du quinaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$  en fonction de la composition en Arsenic des barrières.

En comparant le paramètre de maille du puits  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  avec celui de la barrière quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ , le paramètre de maille de l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  est inférieur à celui du puits  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ , donc le puits tend à se comprimer pour s'adapter à la barrière ce qui se traduit par un éclatement des niveaux d'énergie, augmentation de l'énergie  $E_G$  et diminution de la longueur d'onde. D'autre part, le paramètre de maille du puits se rapproche du paramètre de maille de la barrière pour les faibles concentrations en Arsenic, par contre, quand on augmente la concentration en Arsenic de l'alliage quaternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ , la contrainte augmente.

En comparant le paramètre de maille du puits  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  avec celui de la barrière quinaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$ , on remarque que:

Les paramètres de maille du puits et de la barrière quinaire sont égaux autour d'une concentration en Arsenic  $z = 0.20$  environ, ce qui signifie que les matériaux sont accordés en maille.

Pour des compositions en Arsenic inférieures à  $z = 0.20$  environ, le paramètre de maille du quinaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$  est supérieur à celui du puits  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ . Ceci se traduit par une tension qui provoque une diminution de l'énergie  $E_G$ , augmentation de la longueur d'onde et inversement des niveaux d'énergie (le niveau des trous lourds  $E_{\text{HH}}$  devient au-dessous du niveau des trous légers  $E_{\text{LH}}$ ).

Pour des compositions en Arsenic supérieures à  $z = 0.20$  environ, le matériau est comprimé.

Donc, par rapport à la barrière quaternaire, la barrière quinaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$  permet d'améliorer la contrainte qui résulte du désaccord de maille et on peut avoir la compression ou la détente selon la composition d'alliage.

## I.6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons montré l'intérêt des antimoniures pour les applications dans les lasers émettant dans le moyen infrarouge et dans l'infrarouge lointain.

Nous avons étudié les propriétés des différents alliages à antimoniures binaires, ternaires, quaternaires et quinaire.

Les alliages ternaires ont un seul degré de flexibilité, c'est-à-dire, on peut contrôler uniquement l'énergie du gap ou le paramètre de maille, mais pas les deux en même temps.

Les alliages quaternaires possèdent deux degrés de flexibilité ce qui permet d'ajuster l'énergie du gap indépendamment du paramètre de maille. Cependant, ces alliages présentent la lacune de miscibilité i.e. certaines compositions ne sont pas accessibles chimiquement ce qui nous limite de travailler dans toute la gamme de compositions d'alliage. Ainsi, les hétéro-structures à base des quaternaires présentent un faible confinement des trous dans la bande de valence qui induit le courant de fuite.

L'intérêt de l'alliage quinaire réside dans le fait qu'il possède un degré de flexibilité de plus par rapport aux quaternaires ce qui permet de varier toute une série de paramètres : l'énergie  $E_G$ , le paramètre de maille, les affinités électroniques..., en jouant sur les trois compositions d'alliage (x, y et z) au lieu deux.

En utilisant la barrière quinaire, on améliore le confinement des porteurs. Donc, le courant de fuite diminue, il en résulte un accroissement important du gain.

Nous avons étudié également la contrainte qui résulte du désaccord de maille entre puits/barrière. L'utilisation du quinaire pour la barrière permet d'améliorer les effets de contrainte.

## Références

- [1] J. R. Reboul, L. Cerutti, J. B. Rodriguez, P. Grech, and E. Tournie, Appl. Phys. Lett **99**, 121113, (2011).
- [2] G. Rainò, A. Salhi, V. Tasco, R. Intartaglia, R. Cingolani, Y. Rouillard, E. Tournié, and M. De Giorgi, Appl. Phys. Lett. **92**, 101931, (2008).
- [3] J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, and A. Y. Cho, "Quantum cascade laser", Science, **264**, 553 (1994).
- [4] A. Bismuto, M. Beck, and J. Faist, Appl. Phys. Lett., **98**, 191104, (2011).
- [5] R. Sharma, L. Schrottke, M. Wienold, K. Biermann, R. Hey, and H. T. Grahn, Appl. Phys. Lett., **99**, 151116, (2011).

- [6] Vurgaftman, Meyer and Ram-Mohan, J. Appl. Phys., **89**, 5815, (2001).
- [7] J M AriasT, M Zandianf, R Zuccat and J SinghS, Semicond. Sci. Technol. **8**, 5260, (1993)
- [8] A. Zussman, D. Eger, M. Oron, S. Szapiro, A. Shachna, B. Hans, IEE Proceedings I Solid-State and Electron Devic, Volume **129**, 203 – 207, (1982).
- [9] M. Yin,<sup>1</sup> G. R. Nash, S. D. Coomber, L. Buckle, P. J. Carrington, A. Krier, A. Andreev, S. J. B. Przeslak, G. de Valicourt, S. J. Smith, M. T. Emeny, and T. Ashley, Appl. Phys. Lett, **93**, 121106 (2008).
- [10] A Bauer, K Rübner, T Lehnhardt, M Kamp, S Höfling, L Worschech and A Forchel, Semicond. Sci. Technol.,**26** , 014032, (2011).
- [11] K S Gadedjisso-Tossou, S Belahsene, M A Mohou, E Tournié and Y Rouillard, Semicond. Sci. Technol.,**28** , 015015, (2013).
- [12] G. P. Donati, R. Kaspi, K. J. Malloy, J. Appl. Phys., Vol. **94**, N° 9, 5814, 1 Novembre (2003).
- [13] Paulo Piquini, Peter A. Graf, and Alex Zunger, Physical Review Letter, **100**, 186403, 9 Mai (2008).
- [14] S. Adachi, Appl. Phys. **61**, 4869, (1987).
- [15] M. P. C. M. Krijin, Semicond. Sci. Technol. **6**, 27 (1991), and references therein.
- [16] T. H. Glisson, J. R. Hausser, M. A. Littlejohn, and C. K. Williams, J. Electron. Mater, **7**, 2175, (1978).
- [17] Y. Wang, H. S. Djie and B. S. Ooi, Journal of Applied Physics, **98**, 073508, (2005).
- [18] N. Bouarissa, H. Baaziz, and Z. Charifi, phys. stat. sol. (b) **231**, No. 2, 403-410, (2002).
- [19] R.L. Anderson, Solid-State Electron, **5**, (1962).
- [20] E P O'Reilly, Semiconductor Science and Technology, **4** (3), 121, (1989).

## Chapitre II:

### **Étude d'optimisation des lasers de type I à puits quantiques d'alliages Arséniures d'Antimoniures quaternaires/quinaires :**



II.1. Introduction .....	24
II.2. Applications des s inter-bandes dans le moyen infrarouge.....	25
II.3. Étude du principe de fonctionnement des lasers inter-bandes .....	29
II.4. Étude des différents types de lasers inter-bandes.....	29
II.5. Étude de la structure laser .....	36
II.6. Étude d'optimisation des paramètres du laser de type I à base de l'hétérostructure quaternaire/quinaire $Ga_{1-x}In_xAs_ySb_{1-y}/ Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ .....	40
II.6.a. Calculs de la longueur d'onde d'émission laser.....	40
II.6.b. Calculs de la densité de courant de seuil du laser .....	44
II.6.c. Calculs du gain du laser.....	48
II.7. Conclusion.....	49

## II.1. Introduction :

Dès les débuts du développement des lasers de type I à base d'antimoniures, de nombreux défis se sont posés aux chercheurs :

- Le premier laser réalisé à base d'alliage ternaire  $Ga_{1-x}In_xSb/GaSb$  était avec une région active à structure double hétérojonction et à puits quantiques. Ces structures permettaient l'émission à  $\lambda \leq 1.8 \mu m$  [1,2]. Mais, il présentait de faibles performances tel que : un fort courant de seuil, une faible puissance, un faible fonctionnement à température ambiante et un problème de stabilité du laser à cause principalement de la contrainte de compression qui existe dans l'hétérostructure et des défauts qui en résultent.
- Très vite les chercheurs ont compris qu'il fallait utiliser des alliages quaternaires:  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}$  et  $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ . Les lasers à double hétérojonction [3] et à multi-puits quantiques de type I, à base de  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$  présentent de bonnes caractéristiques pour des longueurs d'onde comprises entre  $2 \mu m$  et  $3 \mu m$ . Nous citons le résultat obtenu pour une longueur d'onde  $\lambda = 2 \mu m$ , la densité de courant de seuil laser est de  $50 A/cm^2$  à température ambiante [4]. Afin d'améliorer la longueur d'onde d'émission et le gain optique du laser, ces structures ont été perfectionnées par l'utilisation de multi-puits quantiques dans la zone active du laser et l'utilisation de couches graduées (GRINSH) [5-8]. Cependant, pour un fonctionnement en mode continu à température ambiante, ces lasers sont limités à  $\lambda \leq 3 \mu m$ . Ceci est dû

d'une part au faible band offset de valence (faible confinement des trous et transition type I-type II de l'hétéro-structure) et d'autre part aux pertes par les recombinaisons non-radiatives de type Auger (quand l'énergie  $E_G$  diminue) et à la fuite des porteurs (quand le confinement est réduit).

- Pour y remédier et améliorer l'alignement de bande, donc améliorer le confinement des trous, l'équipe Walter Schottky Institut de Munich a eu la première l'idée d'utiliser la barrière à base du quinaire  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$  [9]. En effet, cet alliage nous permet d'ajuster l'énergie du gap tout en contrôlant la contrainte entre les semi-conducteurs et la possibilité d'avoir un bon confinement des électrons et des trous. Ce système présente de bonnes performances pour des longueurs d'ondes comprises entre 3 et  $3.4\mu m$  [10,11].

Dans ce chapitre, nous procédons à une étude d'optimisation des lasers de type I à puits quantique à base du système  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ . Nous devons choisir les bonnes compositions d'alliages, la meilleure conception ainsi que la bonne structure, afin d'améliorer la longueur d'onde d'émission, augmenter le gain optique et réduire le courant de seuil du laser.

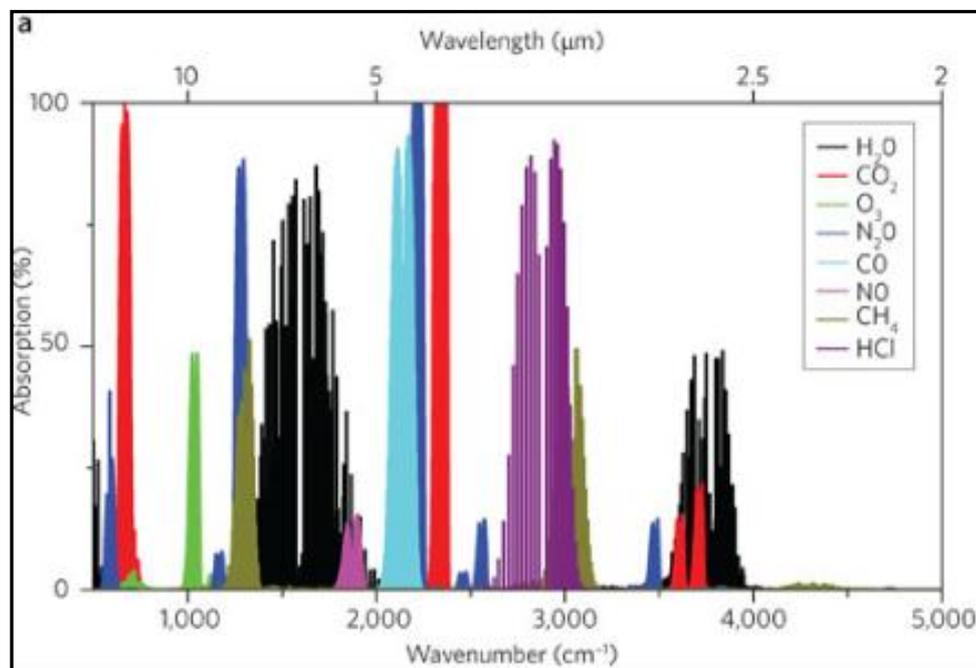
Avant d'aborder les structures lasers  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ , nous allons passer en revue les principales applications des lasers dans le domaine spectral du moyen infrarouge (MIR). Ensuite, nous citons les différents types de lasers à puits quantiques destinés aux applications dans le MIR.

## II.2. Applications des lasers inter-bandes dans le moyen infrarouge

Les lasers inter-bandes à base d'antimoniures sont des sources très bien adaptées aux applications dans le domaine du moyen infrarouge de la gamme  $2\mu m-10\mu m$ . Dans cette gamme, deux fenêtres de transparence de l'atmosphère:  $3-5\mu m$  et  $8-12\mu m$  sont disponibles pour un vaste champ d'applications, notamment : les communications spatiales (air/air et sol/air), la télédétection, la métrologie/spectroscopie de l'environnement, applications industrielles, agro-alimentaires et médicales.

### II.2.1. spectroscopie d'absorption

La majorité des molécules en suspension dans l'atmosphère absorbent dans la gamme du moyen infrarouge qui est comprise entre  $2\ \mu\text{m}$  et  $5\ \mu\text{m}$  (figure II. 1). Dans cette gamme de longueurs d'onde, la plupart des particules présentent une signature moléculaire : un spectre spécifique d'absorption dû aux mouvements de vibration-rotation de la molécule. Le laser est utilisé pour évaluer ces pics d'absorption et identifier ces molécules qui sont à distance ( $>10\text{km}$ ) et qui sont dans des concentrations extrêmement faibles ( $<1\text{ppb}$ ).



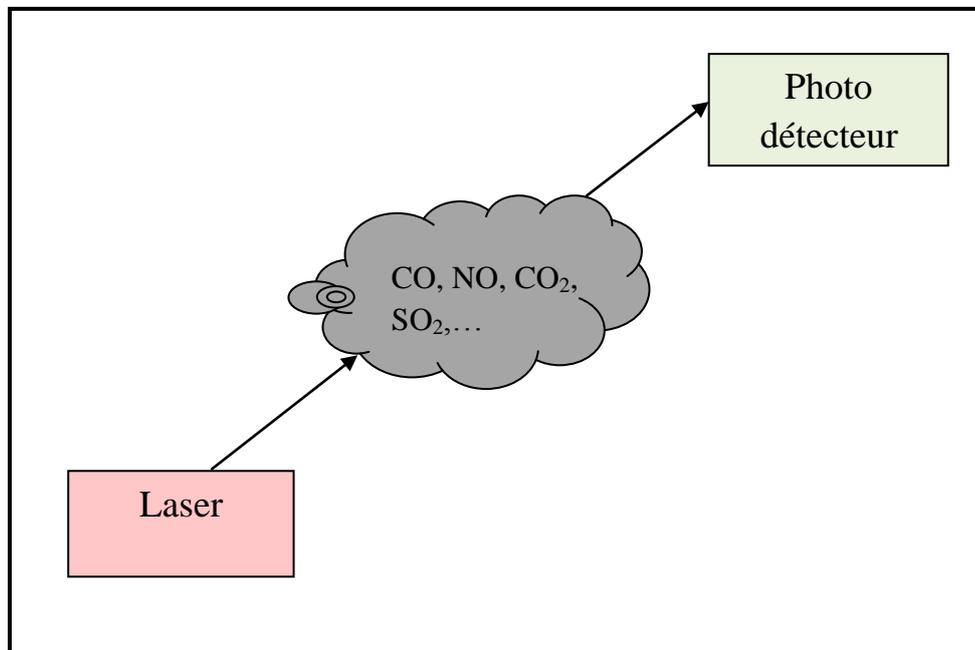
**Figure II.1** : Forces de raies d'absorption de différentes espèces gazeuses entre  $2\ \mu\text{m}$  et  $10\ \mu\text{m}$  [12]

Il existe plusieurs méthodes de détection par les diodes lasers émettant dans le moyen infrarouge, nous citons :

➤ TDLAS (Tunable Diode Laser Spectroscopy) :

La **spectroscopie par diode laser accordable** consiste à envoyer un faisceau laser vers le milieu à sonder, le signal reçu est directement analysé par un détecteur placé en

face du laser. Le détecteur permet de mesurer l'énergie, la hauteur et la largeur d'une raie et donc d'obtenir ainsi la signature du gaz ainsi que sa concentration. Sur la figure II.2, on schématise le principe de cette méthode.



*Figure II.2 : Schéma de principe de la méthode TDLAS*

➤ Le LIDAR (Light Detection And Ranging) :

Le **LIDAR** est un acronyme de **L**ight **D**etection **A**nd **R**anging, est une technique de mesure et de détection à distance qui permet de déterminer la concentration des particules et la distance à laquelle se trouvent les molécules à sonder. La figure II.3 illustre un LIDAR en action.



*Figure II.3: Un Lidar en action [13]*

## II.2.2. Applications militaires

La reconnaissance des véhicules de tout type et autres équipements présents sur un lieu d'opérations militaires est une tâche importante à accomplir pour les militaires. Il s'agit de détecter la cible en temps réel et déterminer à quel type elle correspond: char, camion.... Les diodes lasers moyen infrarouge peuvent être utilisées pour le guidage de missiles: il s'agit de détecter le mouvement et désigner une cible lointaine et le tir se dirige ainsi vers l'objet éclairé. D'autres applications des lasers moyens infrarouges sont les contre-mesures optiques pour aveugler un détecteur adverse (figure II.4).



*Figure II.4 : Illustration de contre-mesure infrarouge. [14]*

## II.2.3. Applications aux télécommunications spatiales :

Les communications en espace libre utilisent les fenêtres de transparence ( $2\mu\text{m}$ - $2.7\mu\text{m}$ ), ( $3\mu\text{m}$ - $5\mu\text{m}$ ) et ( $8\mu\text{m}$ - $14\mu\text{m}$ ) de l'atmosphère (figure II.5). Ces gammes spectrales sont plus favorables, car elles sont faiblement sensibles à la diffusion de Rayleigh. Celle-ci est proportionnelle à l'inverse du carré de la longueur d'onde ( $1/\lambda^2$ ) et aux perturbations atmosphériques (pluie, brouillard, pollution...)

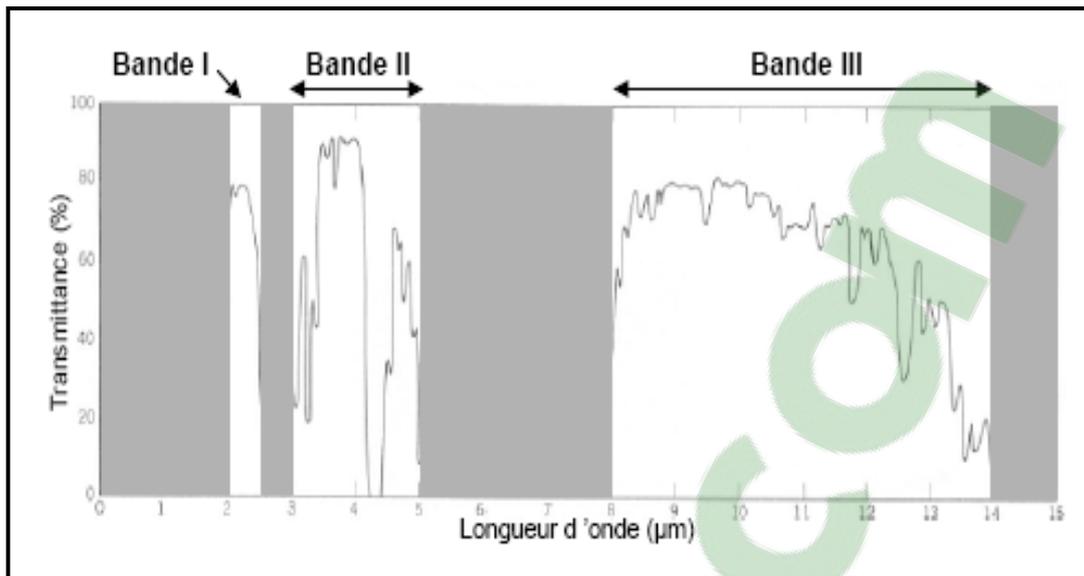


Figure II.5 : Fenêtre de transmission de l'atmosphère dans le moyen infrarouge.

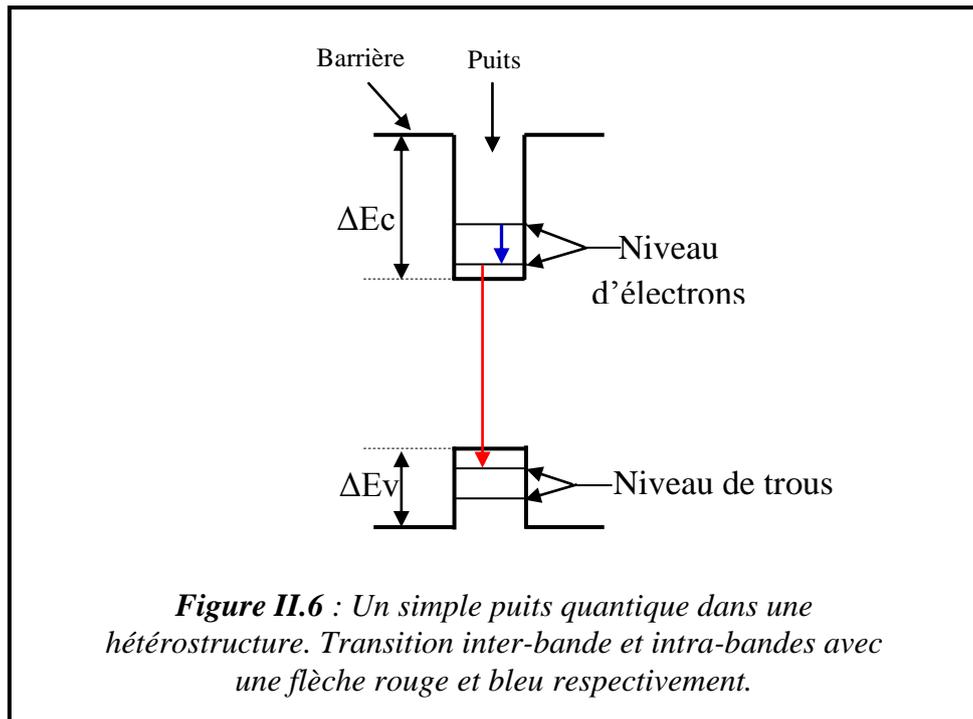
### II.3. Étude du principe de fonctionnement des lasers inter-bandes

Le fonctionnement des lasers inter-bandes repose sur les transitions optiques entre les électrons de la bande de conduction et les trous de la bande de valence. La zone active du laser est la zone d'émission laser, elle est constituée de puits quantiques qui peuvent être de plusieurs types comme on le décrit dans la suite de cette partie.

### II.4. Étude des différents types de lasers inter-bandes

#### II.4.1. Structure à simple puits quantique :

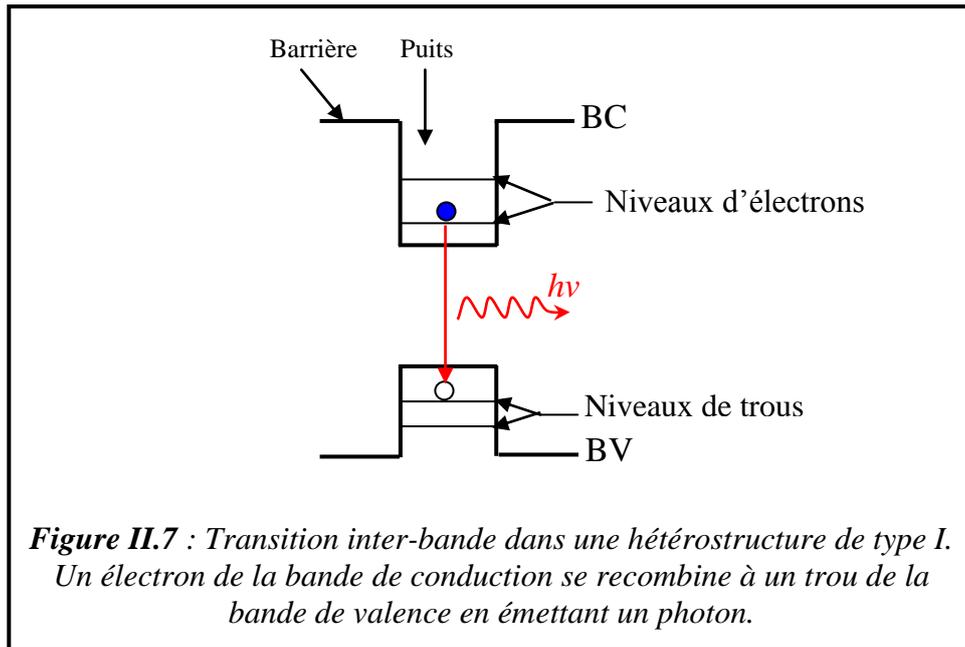
Un **simple puits quantique** est formé par deux semi-conducteurs de gaps très différents. L'appellation quantique est dû au fait que l'épaisseur du puits est inférieure ou égale de la longueur d'onde de De Broglie des électrons et des trous confinés dans le puits. Il en résulte un confinement quantique qui se traduit par l'apparition dans le puits des niveaux discrets d'énergie entre lesquels des transitions radiatives (inter-bandes ou intra-bandes) peuvent se produire (figure II.6).



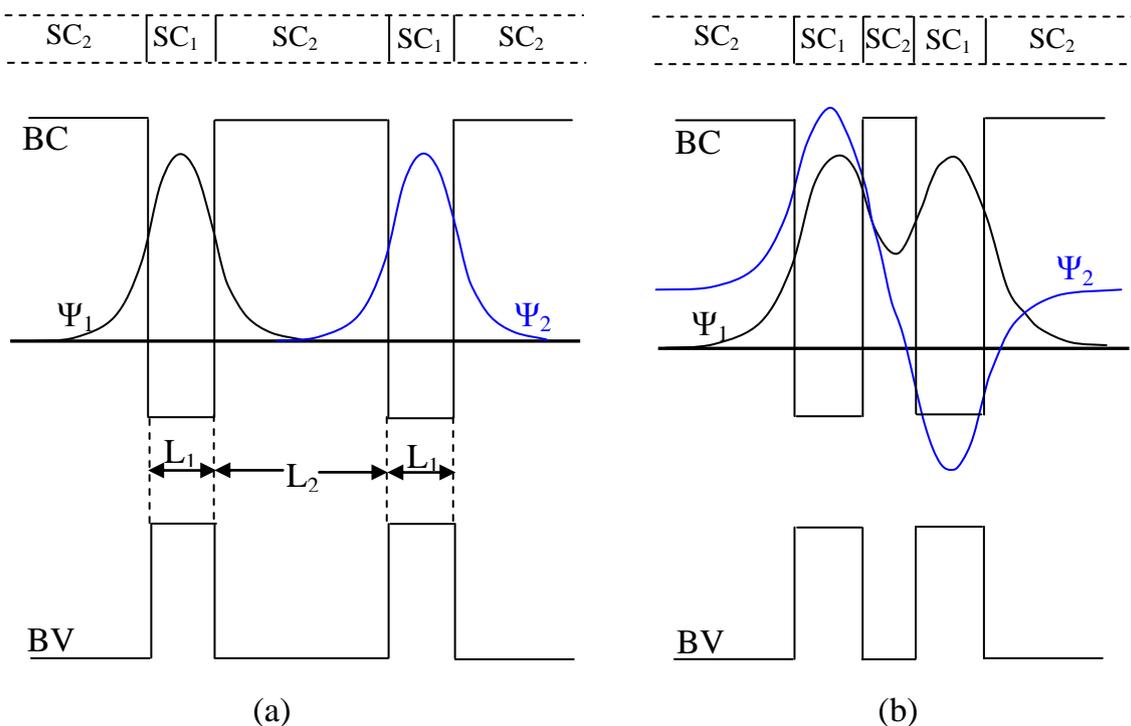
En jouant sur l'épaisseur du puits et sur la composition d'alliage, on peut modifier de nombreux paramètres tels que: le gap, le band-offset ( $\Delta E_C$ ,  $\Delta E_V$ ) ainsi que les niveaux d'énergie discrets d'électrons et de trous. Il existe trois types de structures lasers à puits quantiques :

#### a. Laser à puits quantiques de type I

Ce type de lasers fonctionne sur des hétérostructures où les électrons et les trous sont confinés dans la même couche semi-conductrice. Il en résulte des transitions directes par la recombinaison d'un électron de la bande de conduction avec un trou de la bande de valence (figure II.7). Donc, la longueur d'onde du rayonnement émis dépend principalement de l'énergie de la bande interdite du semi-conducteur utilisé pour le puits. Cette longueur d'onde dépend également des énergies de confinement des électrons et des trous qui à leur tour dépendent de l'épaisseur (géométrie) de la couche confinée. Pour l'émission aux grandes longueurs d'onde, il est nécessaire d'utiliser des matériaux à faibles gaps, d'où les antimonies.



Afin d'améliorer les performances des lasers de type I, on peut mettre plusieurs puits quantiques dans la zone active du laser. On distingue deux types:



**Figure II.8:** Structure à double puits quantiques. (a) puits quantiques découplés, (b) puits quantiques couplés

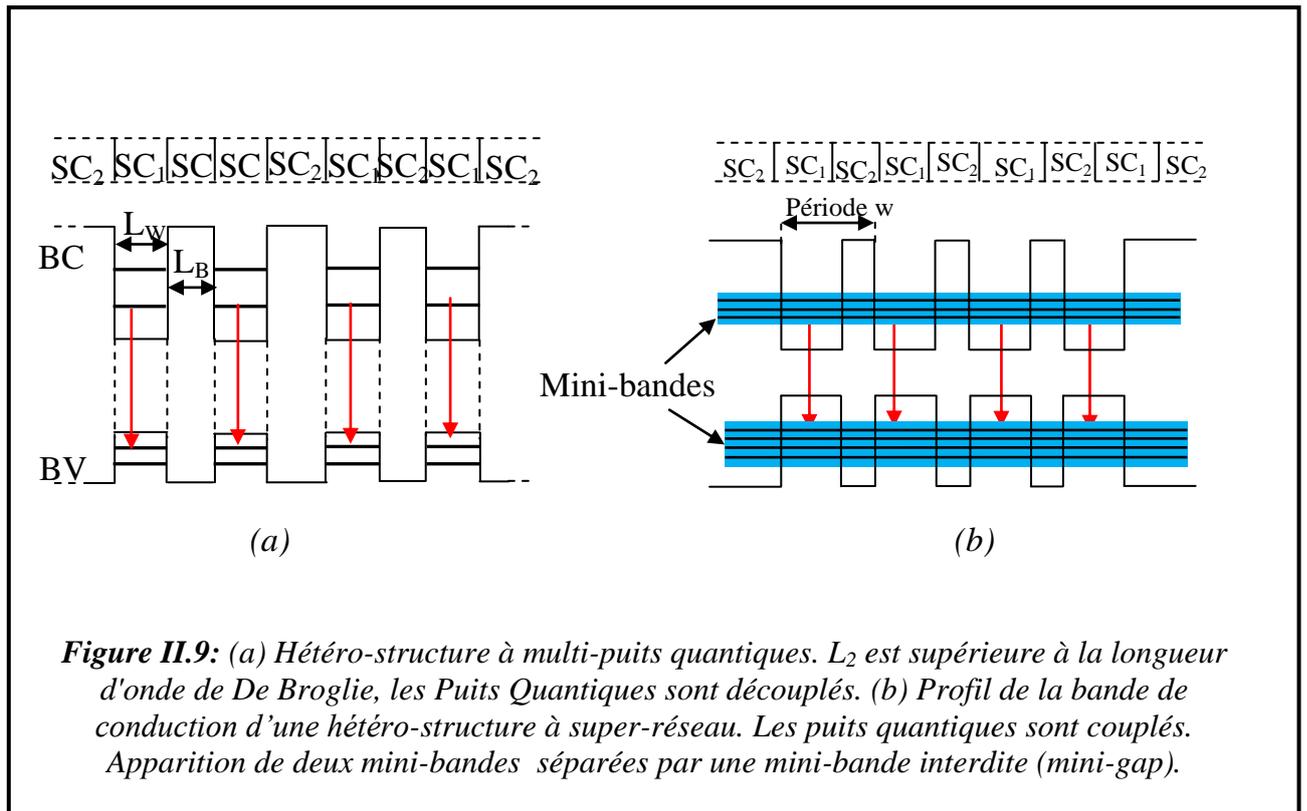
CLICOURS.COM

- **Puits quantiques découplés** : si l'épaisseur  $L_2$  de la barrière (SC2) est supérieure à l'extension de la fonction électronique, le recouvrement des fonctions d'ondes de sites voisins sera faible et l'électron n'a pas assez de probabilité pour passer d'un puits à un autre à travers la barrière par le processus d'effet tunnel. On dit que les deux puits sont découplés l'un de l'autre. Nous montrons sur la figure II.8 (a), le découplage dans une structure à double puits quantiques. Une succession de puits quantiques découplés est appelée : structure à multi-puits quantiques (figure II.9 (a)). De telles structures présentent l'avantage d'augmenter le gain optique et de réduire la densité du courant de seuil du laser.

- **Puits quantiques couplés** : si l'épaisseur  $L_2$  de la barrière (SC2) est inférieure à l'extension de la fonction électronique, le recouvrement des fonctions d'ondes de sites voisins sera important et l'électron aura assez de probabilité pour passer d'un puits à un autre à travers la barrière par le processus d'effet tunnel. On dit que les deux puits sont couplés (figure II.8 (b)). Les états électroniques dans chacun des puits sont quantifiés et présentent une structure de sous-bandes d'énergie. Une succession de puits quantiques fortement couplés et périodique est appelé : super-réseau (figure II.9 (b)).

Le super-réseau est caractérisé par une période «  $w$  » qui est égale à la somme des épaisseurs d'un puits et d'une barrière.

Le couplage des puits se traduit par une levée de dégénérescence des niveaux discrets d'énergie dans les puits et formation de "mini-bandes" d'énergie séparées par une mini-bande interdite (mini-gap). L'utilisation du super réseau pour la zone active du laser permet d'améliorer le recouvrement des fonctions d'onde des porteurs mais ces lasers présentent un gain plus faible que celui obtenue dans les lasers à multi-puits quantiques à cause de la caractéristique de la densité d'état, le super-réseau est caractérisé par une densité d'états quasi tridimensionnelle [15].



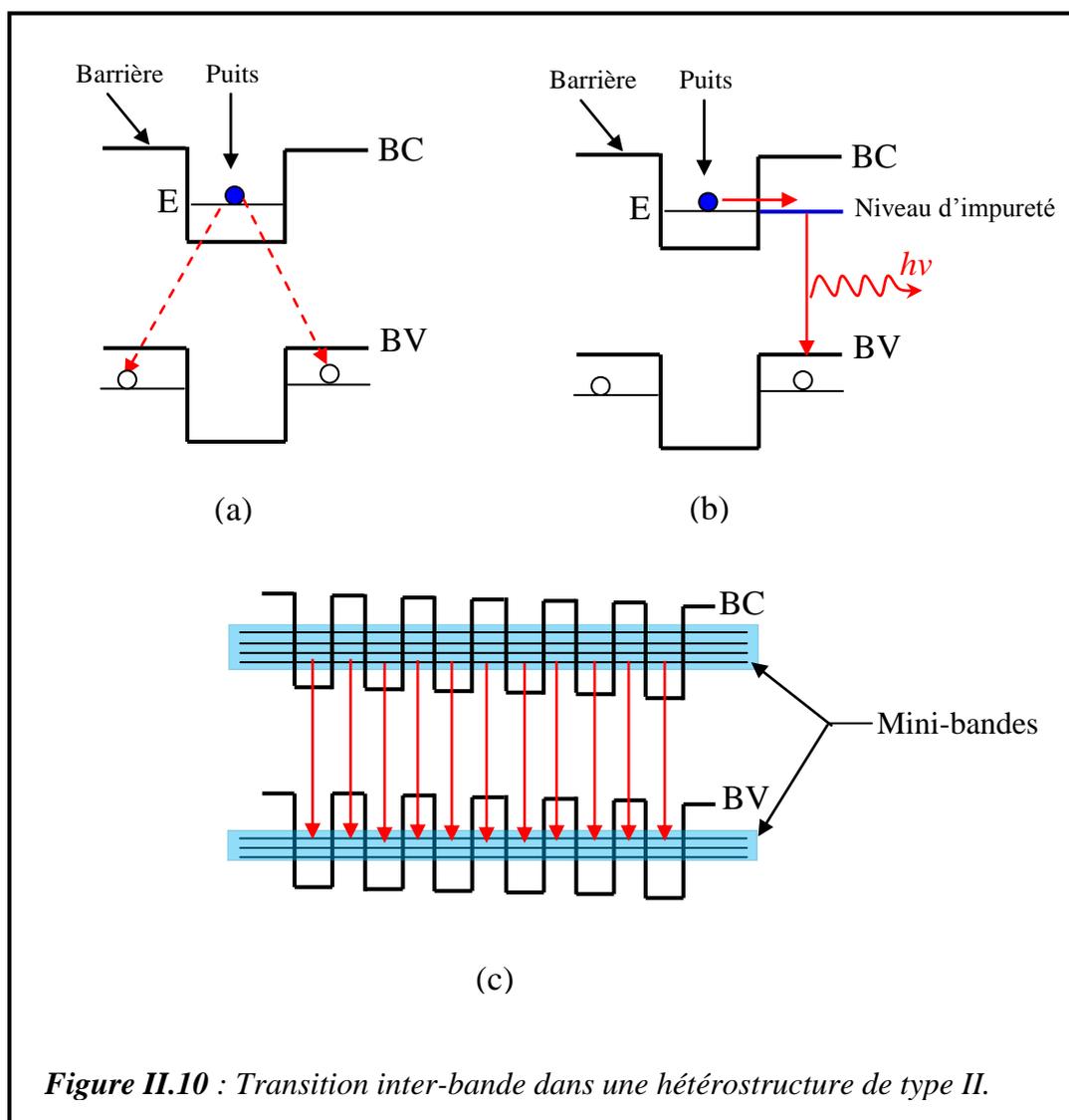
### b. Laser à puits quantiques de type II

Dans les lasers à puits quantiques de type II, les porteurs de charges sont spatialement séparés (figure II.10) i.e. l'électron et le trou sont confinés dans des couches différentes. Dans ce cas, l'émission laser entre le niveau  $E_1$  de la bande de conduction et les niveaux des trous de la bande de valence ne peut pas être réalisée directement par transition verticale et la transition oblique est interdite (voir pointillés sur la figure II.10 (a)). Cependant, on peut obtenir une transition laser en créant un état virtuel intermédiaire qui joue le rôle de relais. On peut citer les deux possibilités suivantes:

1. Par dopage de la barrière, il apparaît un niveau d'impureté localisé en résonance avec le niveau  $E_1$  de la bande de conduction (figure (II.10(b))). Ce niveau d'impureté joue le rôle de niveau relais qui permet à l'électron de transiter horizontalement par effet tunnel du niveau  $E_1$  de BC vers le niveau virtuel relais (état créé par impureté).

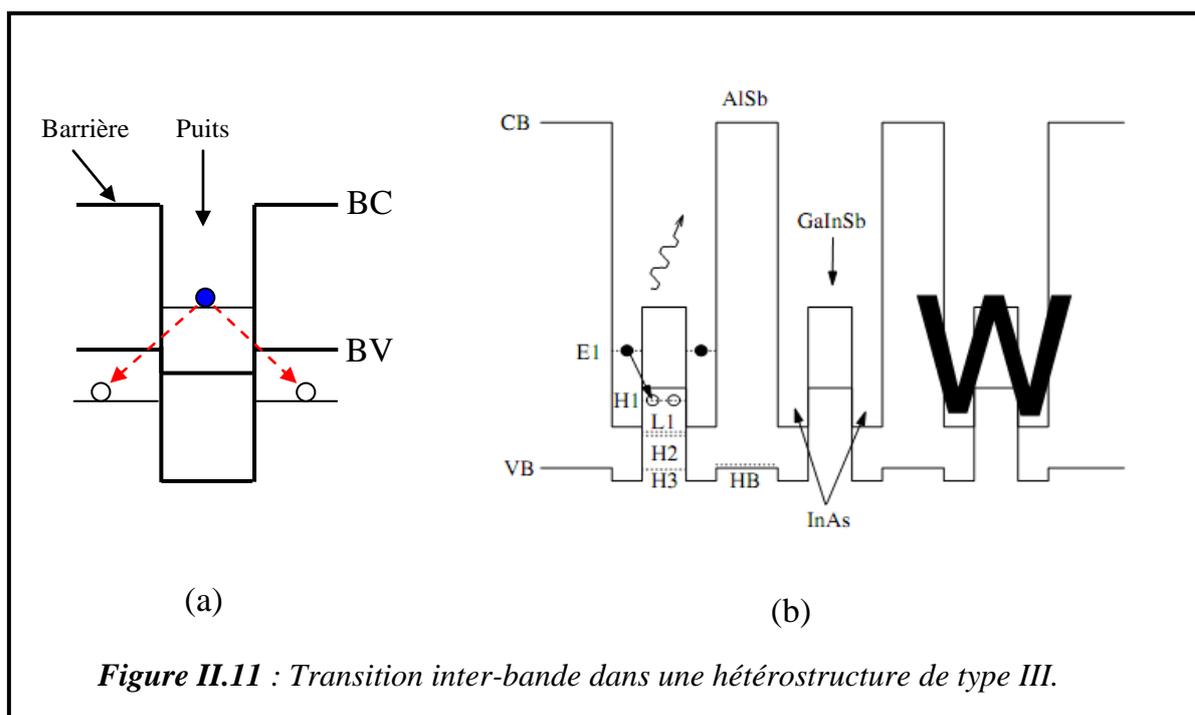
Ensuite, l'électron fait une transition radiative verticale en recombinant avec le trou de la bande de valence. Ce principe est utilisé notamment pour réaliser des diodes émettrices de lumière : cas du GaAsP(N)/GaAs. Cependant, pour les diodes lasers, ce concept présente de faibles performances.

2. En utilisant un super-réseau : une succession de puits et de barrières de très faibles épaisseurs, il apparaît dans les bandes de conduction et de valence une mini-bande (figure II.10 (c)). Dans ce cas, la transition laser peut être réalisée entre la mini-bande de la bande de conduction avec celle de la bande de valence. Cependant, il est très délicat à optimiser en même temps les largeurs des mini-bandes de conduction et de valence.



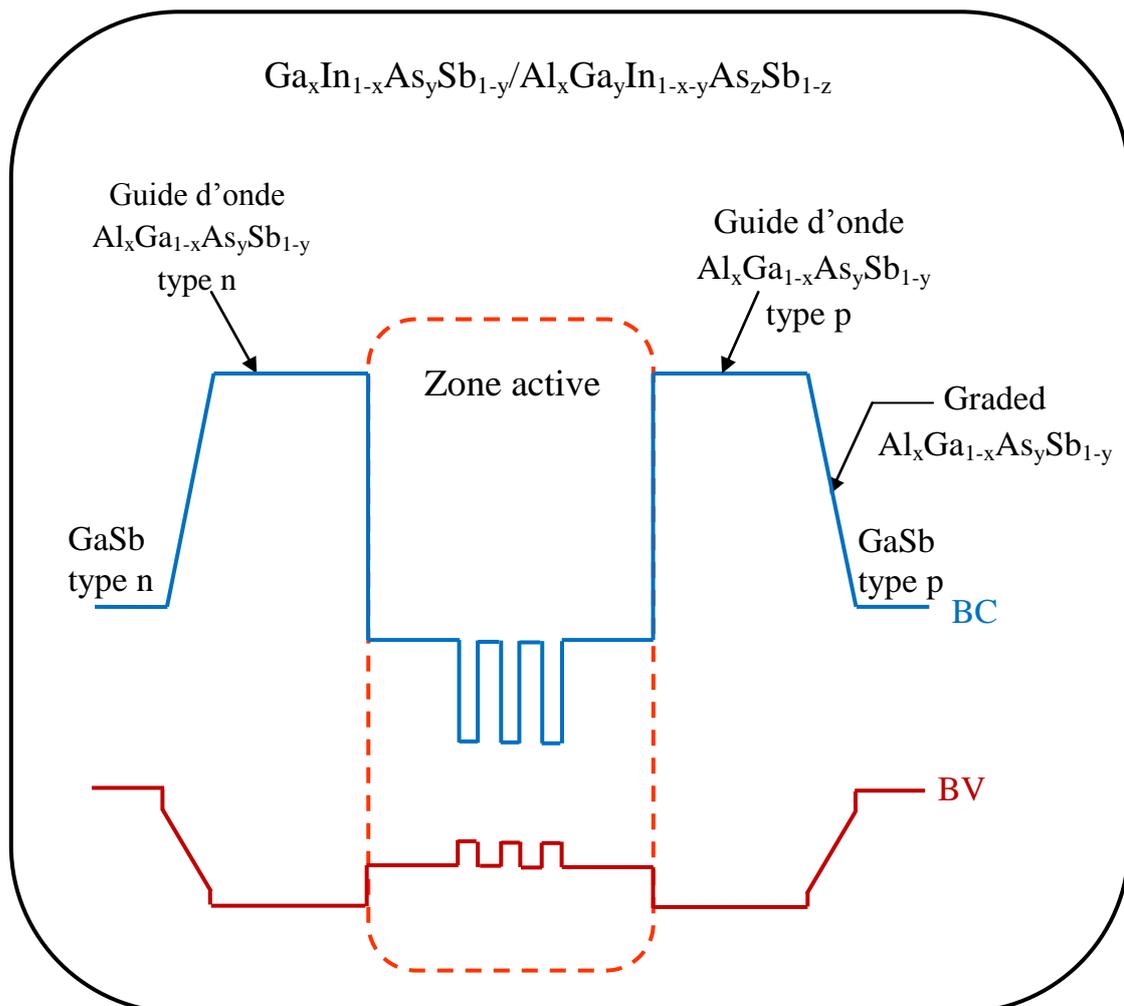
### c. Laser à puits quantiques de type III

Ce type de laser est un cas particulier du type II, la bande de conduction du  $SC_2$  se trouve à une énergie inférieure à la bande de valence dans le  $SC_1$  (figure II.11 (a)). Dans ce cas d'alignement de bande, des structures particulières ont été obtenues pour avoir une émission laser. Ces structures sont appelées « lasers W » où la zone active est constituée de deux puits quantiques couplés de type III formant la lettre W. Sur la figure II.11 (b), nous montrons le profil de la bande de conduction d'un laser de type W, où la zone active est constituée d'un puits quantique de trous à base de GaInSb inséré entre deux puits quantiques d'électrons à base de InAs et séparé de la période adjacente par une grande barrière à base de AlSb [16].



## II.5. Étude de la structure laser

La structure optimale du laser à puits quantiques  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$  est illustrée sur la figure II. 12. La structure comprend la zone active du laser, un guide d'onde et une couche graduée de  $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ .



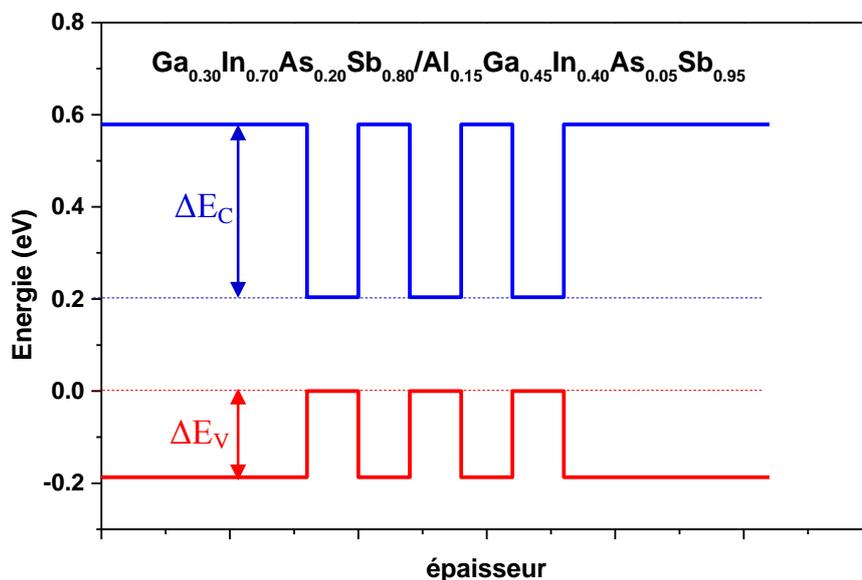
**Figure II.12 :** Représentation de la structure du laser à puits quantiques  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$

### II.5.1. Zone active

La zone active est la zone d'émission du laser. C'est une hétérostructure à trois puits quantiques de type I, formée par l'alliage quaternaire  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_{0.20}Sb_{0.80}$  pour le puits et l'alliage quinaire  $Al_{0.15}Ga_{0.45}In_{0.40}As_{0.05}Sb_{0.95}$  pour la barrière. Les compositions d'alliages ont été déterminées de telle manière à avoir : une hétérostructure de type I, une bonne contrainte ( $\Delta a/a \leq 2\%$ ) et un bon confinement des électrons et des trous.

Le confinement des électrons et des trous ( $\Delta E_C$  et  $\Delta E_V$ ) est calculé à partir de la loi 2/3-1/3 d'Anderson [17].

Sur la figure II.13, nous montrons le diagramme de bande de puits quantiques de  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_{0.20}Sb_{0.80}/Al_{0.15}Ga_{0.45}In_{0.40}As_{0.05}Sb_{0.95}$ .



**Figure II.13:** Diagramme de bande de puits quantique de  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_{0.20}Sb_{0.80}/Al_{0.15}Ga_{0.45}In_{0.40}As_{0.05}Sb_{0.95}$

Cette structure est caractérisée par une faible contrainte de compression du puits qui est de l'ordre de 0.72%,  $\Delta E_C = 0.375$  eV et  $\Delta E_V = 0.187$  eV.

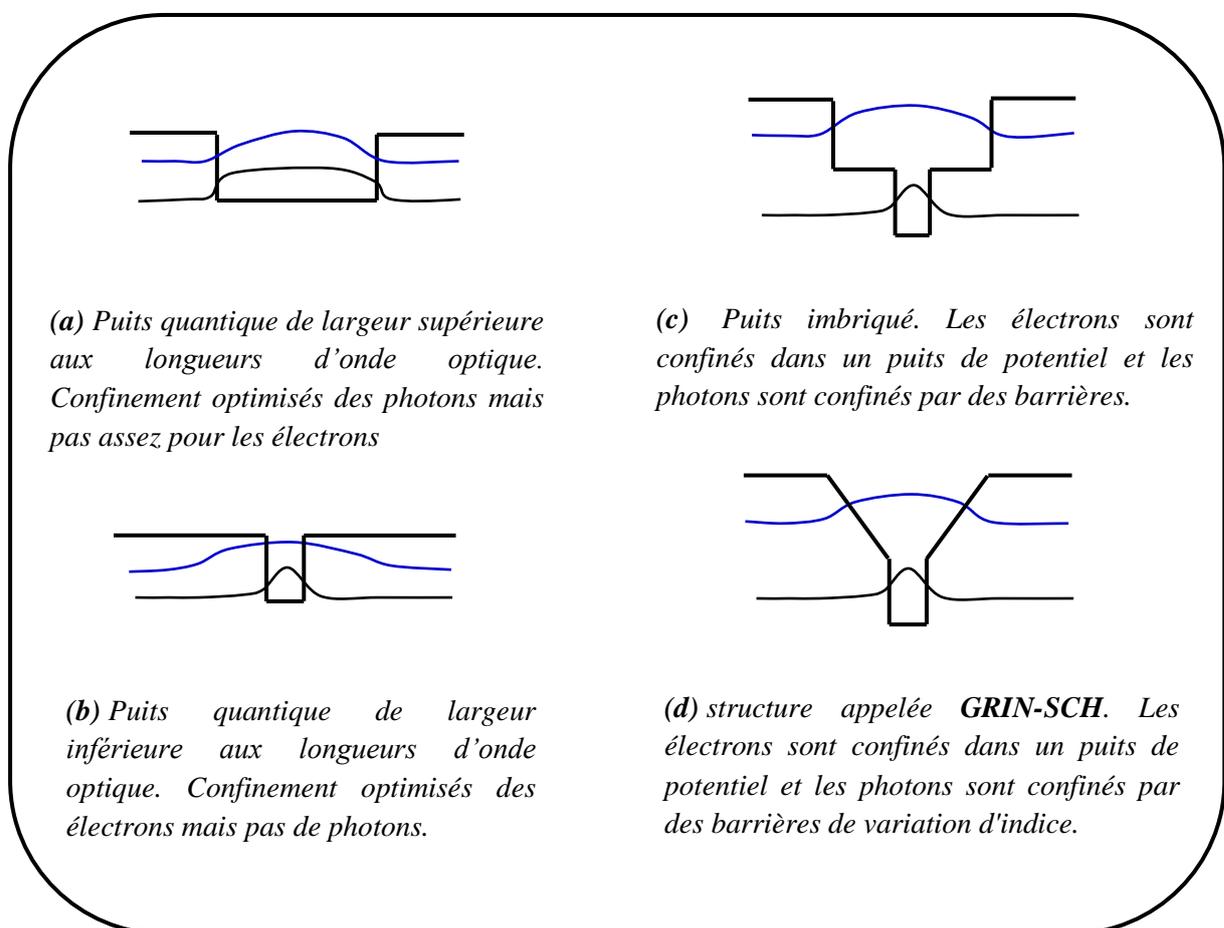
### II.5.2. Guide d'onde

Le guide d'onde est à base de l'alliage quaternaire  $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$  avec une forte concentration en aluminium (x en Al) par rapport aux barrières et aux couches graduées (GRIN-SCH), afin de créer une différence importante d'indice de réfraction

pour confiner les photons. Afin d'éviter l'oxydation du matériau, les concentrations adéquates en Al sont entre 85% à 90% [18,19].

Pour le dopage type n et type p, l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$  est dopé avec du tellure (Te) et du béryllium (Be) respectivement.

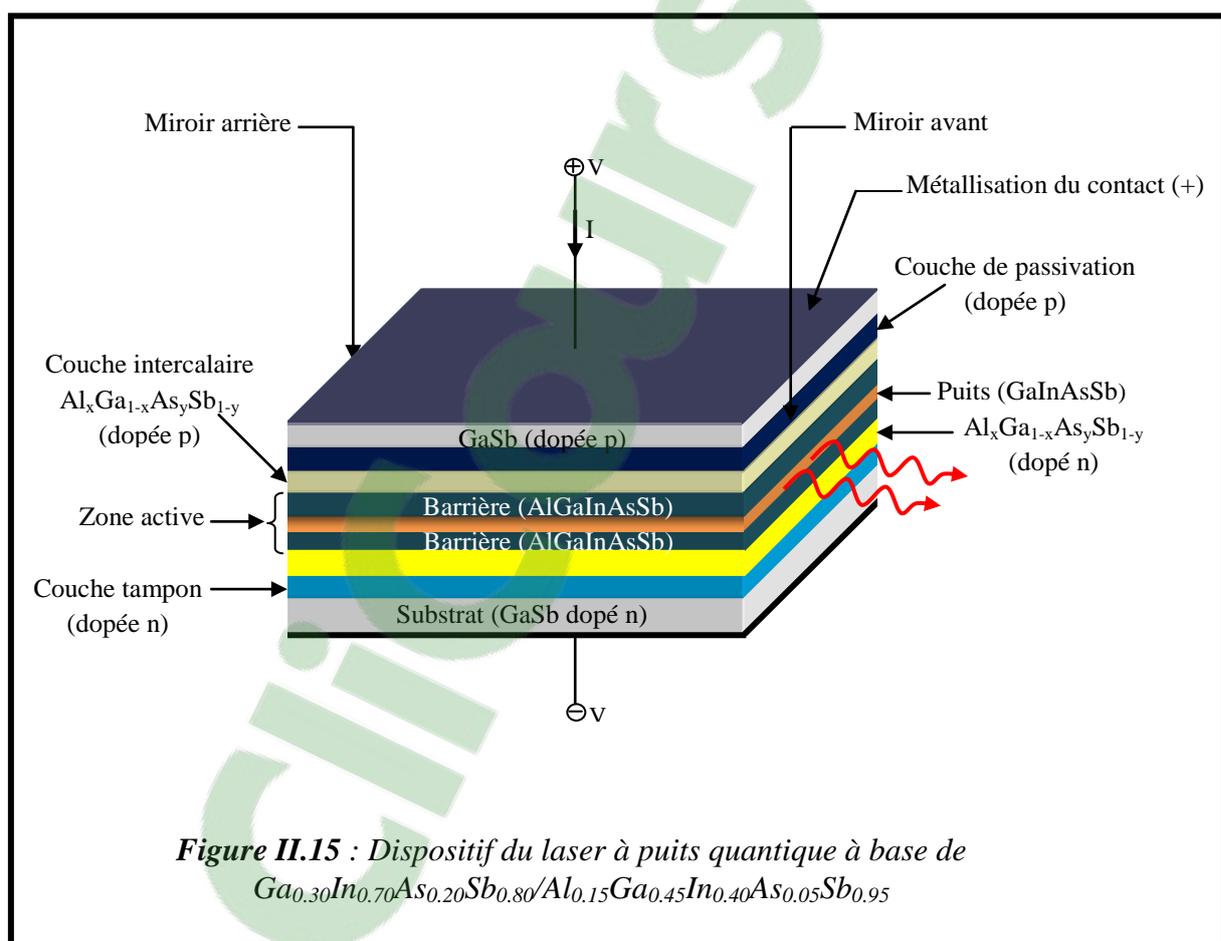
### II.5.3. GRIN-SCH



**Figure II.14** : Effet de confinement dans différentes structures. Le confinement des photons est représenté en couleur bleu et le confinement des électrons est représenté en noir.

Une couche graduée à base du matériau quaternaire  $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$  est utilisée pour confiner les photons. Il s'agit d'une structure appelée GRIN-SCH (Graded Index Separate Confinement Heterostructure) qui permet de séparer le confinement des électrons à celui des photons. C'est une structure composée de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$  en différentes concentrations. On montre suivant la figure II.14, l'effet de confinement des électrons et des photons dans différentes structures.

Le dispositif du laser  $Ga_{0,30}In_{0,70}As_{0,20}Sb_{0,80}/Al_{0,15}Ga_{0,45}In_{0,40}As_{0,05}Sb_{0,95}$  peut être représenté suivant la figure II.15. Il s'agit d'une structure constituée d'une zone active mise dans une jonction p-n, réalisée entre deux couches de confinement à base du quaternaire  $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$  dopé n d'un côté et dopé p de l'autre côté.



La couche tampon est utilisée pour absorber les impuretés et rattraper le désaccord de maille entre le substrat et la barrière.

La couche intercalaire insérée est en contact avec la couche métallique afin de pouvoir injecter le courant dans le dispositif. Les photons sont émis à partir de la zone active puis sont piégés dans une cavité optique appelée cavité de Fabry-Pérot. Cette dernière est réalisée par un clivage des faces avant et arrière.

## II.6. Étude d'optimisation des paramètres du laser de type I à base de l'hétéro-structure $Ga_{1-x}In_xAs_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$

Dans cette partie, nous procédons à une étude d'optimisation des paramètres de fonctionnement du laser de type I à base de l'hétérostructure  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_{0.20}Sb_{0.80}/Al_{0.15}Ga_{0.45}In_{0.40}As_{0.05}Sb_{0.95}$ . Nous rappelons que cette hétérostructure présente une faible contrainte de compression mais une forte non-parabolicité et de mixing de bandes, dus au faible gap de l'alliage  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_{0.20}Sb_{0.80}$  et du couplage entre la bande de conduction et la bande de valence. Ces effets influents fortement sur : les masses effectives de conduction et de valence, l'énergie du gap, les énergies de confinement et par conséquent sur la longueur d'onde d'émission, le gain optique et la densité de courant de seuil laser. Dans le chapitre V, nous étudions en détail les effets de contrainte et de non-parabolicité sur les principaux paramètres du laser et dans cette partie de ce chapitre, nous montrons cette influence sur : les énergies de confinement, la longueur d'onde, la densité de courant et sur le gain optique du laser.

### II.6.a. Calculs de la longueur d'onde d'émission laser

La longueur d'onde d'émission laser est donnée par cette équation :

$$\lambda = \frac{1.24}{h\nu} (\mu m) \quad (II.1)$$

Tel que

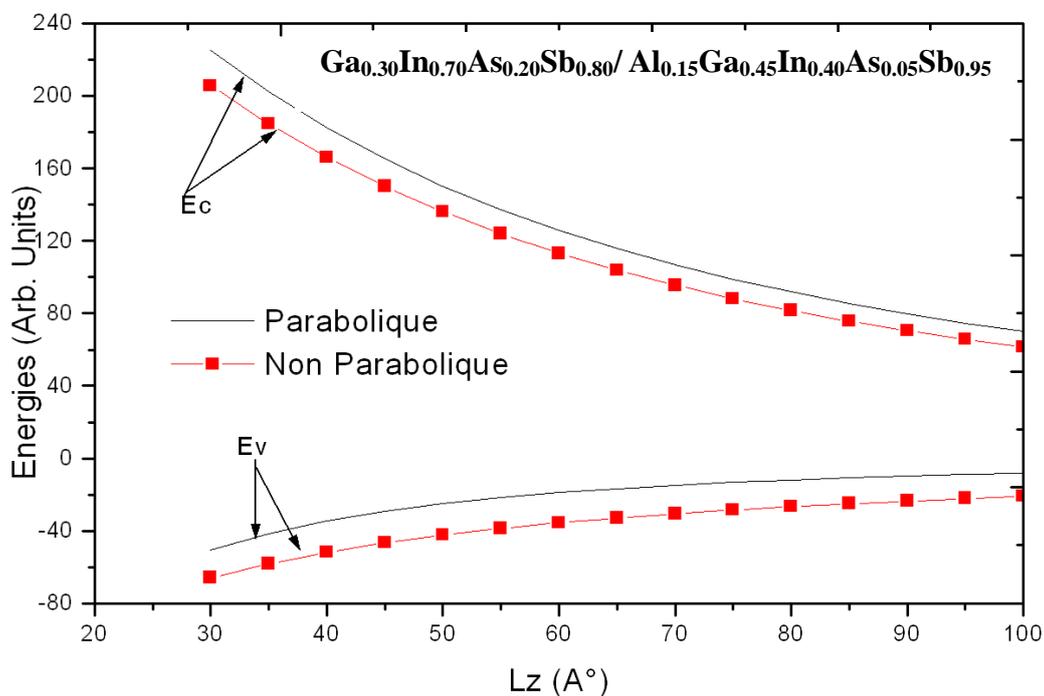
$$h\nu = E_{Tr} = E_G + E_{Cn} + E_{Vn} \quad (II.2)$$

Où :  $E_{Cn}$  est l'énergie du niveau dans la bande de conduction calculée par la résolution de l'équation de Schrödinger.

$E_{Vn}$  est l'énergie du niveau dans la bande de valence.

L'équation II.2 indique que la longueur d'onde d'émission laser dépend des énergies du gap  $E_G$  et de confinements  $E_C$  et  $E_V$ .

### ➤ Énergie de confinement



**Figure II.16** : Variation des énergies  $E_C$  et  $E_V$  en fonction de la largeur  $L_Z$  pour les modèles parabolique et non parabolique représentés en noir et en rouge respectivement.

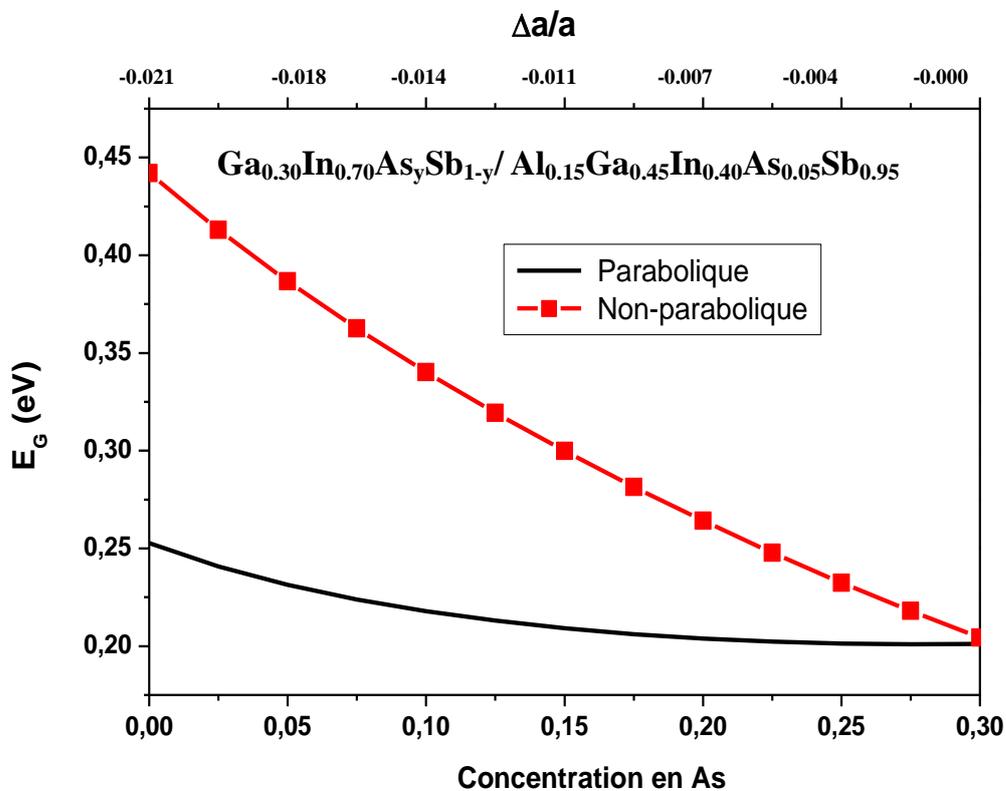
Nous représentons sur la figure II.16 la variation des premières sous-bandes d'énergies de confinement  $E_C$  et  $E_V$  de l'hétéro-structure  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_{0.20}Sb_{0.80}/Al_{0.15}Ga_{0.45}In_{0.40}As_{0.05}Sb_{0.95}$ , en fonction de la largeur  $L_Z$ , pour les modèles parabolique et non-parabolique.

En comparant le cas parabolique avec celui non-parabolique, on remarque qu'en tenant compte des effets de non-parabolicité, les énergies  $E_C$  et  $E_V$  diminuent. Ces énergies de

confinement dépend principalement des masses effectives des électrons pour  $E_C$  et des trous pour  $E_V$  et dépend également de la largeur du puits. La non-parabolicité provoque une diminution de l'ordre de 17.7% des énergies  $E_C$  et  $E_V$ .

### ➤ Énergie du gap

Dans les lasers inter-bandes de type I, la longueur d'onde d'émission dépend nettement de l'énergie du gap du puits  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_{0.20}Sb_{0.80}$ . Dans ce paragraphe, nous étudions la variation de l'énergie  $E_G$  en fonction de la concentration en As et de la contrainte. Nous montrons une augmentation du gap non-parabolique.

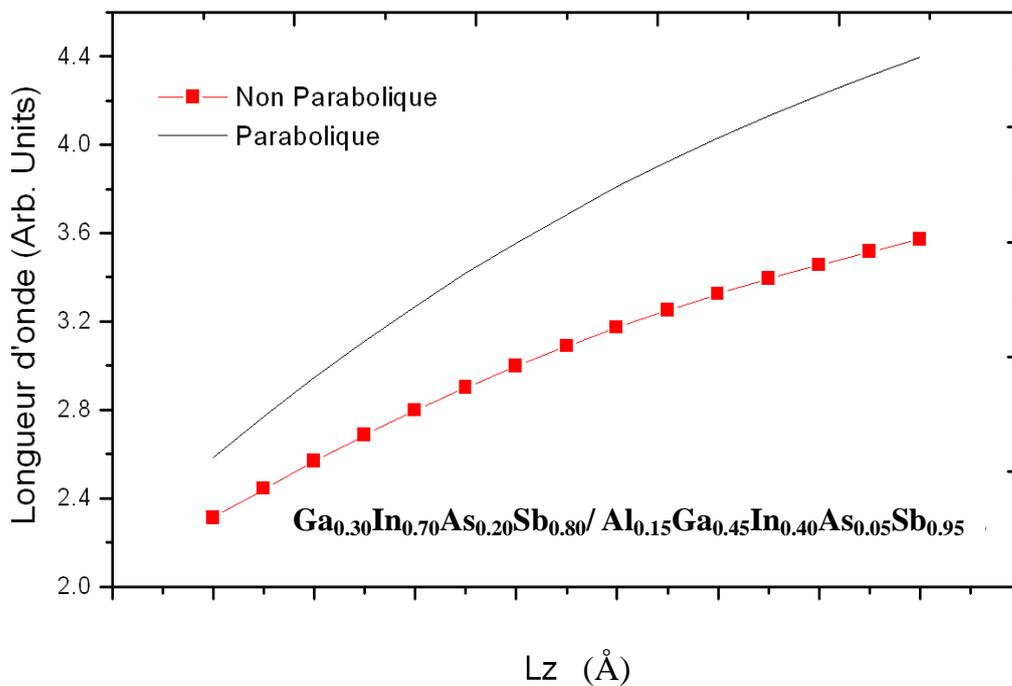


**Figure II.17** : Variation de l'énergie du gap parabolique en noir et non-parabolique en rouge en fonction de la concentration en As.

La figure II.17 montre que les modèles parabolique et non-parabolique donnent la même valeur de  $E_G$  pour  $y = 0.30$ , où le puits  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_ySb_{1-y}$  est en accord de maille avec la barrière et par conséquent, il n'y a pas l'effet de non-parabolicité et de mixing de bandes. Par contre, quand on diminue la concentration en As dans le puits, une contrainte bi-axiale de compression augmente avec la diminution de la

concentration en As dans le puits  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_ySb_{1-y}$  et les modèles parabolique et non-parabolique présentent des variations assez différentes. Sous l'effet de la contrainte de compression, il en résulte les effets de non-parabolicité et de mixing de bandes provoquant une augmentation importante de l'énergie  $E_G$ . Pour le puits  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_{0.20}Sb_{0.80}$ , l'augmentation de l'énergie  $E_G$  est estimée à 29.5%. Cette augmentation de l'énergie du gap conduit à une diminution de la longueur d'onde d'émission.

Sur la figure II.18, nous représentons la variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur  $L_Z$  pour les cas parabolique et non-parabolique.



**Figure II.18:** Variation de la longueur d'onde d'émission en fonction de la largeur  $L_Z$  pour les modèles parabolique et non parabolique représentés en noir et en rouge respectivement.

Notre étude sur la variation des énergies de confinement  $E_C$  et  $E_V$  et sur la variation du gap confirme que la longueur d'onde augmente avec l'augmentation de la largeur  $L_Z$ . Quand on augmente la largeur du puits, les énergies de confinements diminuent,

l'énergie de transition laser diminue, il s'ensuit donc une augmentation de la longueur d'onde. Par contre, l'influence de la contrainte et de la non-parabolicité provoque une faible diminution des énergies de confinement et une augmentation importante du gap ce qui se traduit par une diminution de la longueur d'onde d'émission. Cette diminution de la longueur d'onde non-parabolique est de plus en plus importante quand on augmente la largeur du puits  $L_Z$ . Elle est estimée à 47.34% pour la plus faible épaisseur du puits et à 34.21% pour une valeur maximale de la largeur du puits. Cet effet provoque un décalage vers les courtes longueurs d'onde qui se traduit par un décalage vers le bleu (blue shift).

### II.6.b. Calculs de la densité de courant de seuil

#### ➤ Facteur de confinement

Le facteur de recouvrement est un paramètre qui permet de déterminer l'efficacité du recouvrement électron-photons. Il est défini par l'équation suivante [15]:

$$\Gamma = \frac{\int_{-L/2}^{+L/2} E^2(z) dz}{\int_{-\infty}^{+\infty} E^2(z) dz} \quad (\text{II.3})$$

Tel que L est la largeur du puits utilisé dans la zone active et E(z) est la variation du champ électrique du rayonnement suivant z.

L'équation II.3, peut être simplifiée par [14]:

$$\Gamma \approx \frac{D^2}{D^2 + 2} \quad (\text{II.4})$$

Tel que D est l'épaisseur normalisée de la zone active et qui est déterminée par [15]:

$$D = \frac{2\pi}{\lambda} d(n_P^2 - n_B^2)^{1/2} \quad (\text{II.5})$$

Où  $\lambda$  est la longueur d'onde du rayonnement émis et  $d$  l'épaisseur de la zone active.  $n_p$  et  $n_b$  sont respectivement les indices de réfraction du puits et de la barrière.

Le facteur de recouvrement augmente quand on augmente l'épaisseur  $d$  et il diminue quand la longueur d'onde augmente. Pour avoir un facteur de confinement optimal, il est nécessaire d'utiliser des structures à multi-puits quantiques et à confinement séparés (GRIN-SCH). La relation qui définit le facteur de confinement  $\Gamma_w$  pour une structure à multi-puits quantiques est définie comme suit :

$$\Gamma_{mp} = \bar{\Gamma} \frac{N_p d_p}{N_p d_p + N_b d_b} \quad (\text{II.6})$$

Tel que :  $N_p$ ,  $N_b$ ,  $d_p$ ,  $d_b$  sont respectivement le nombre de puits et des barrières et leurs épaisseurs.

$\bar{\Gamma}$  est donné par :

$$\bar{\Gamma} = \frac{\bar{D}^2}{2 + \bar{D}^2} \quad (\text{II.7})$$

Avec

$$\bar{D} = \frac{2\pi}{\lambda} (\bar{n}_p^2 - n_b^2)^{1/2} \bar{d} \quad (\text{II.8})$$

$\bar{d}$  est l'épaisseur de la région couvrant l'ensemble des multi-puits.

### ➤ Gain max du laser

Le gain optique est donné par l'expression suivante [20]:

$$g(h\nu) = \frac{n_r}{2c_0} \frac{\pi}{\varepsilon_0 h \nu} \left[ \frac{e}{m_0} \right]^2 \left| \frac{m_0 P}{\hbar} \right|^2 \int_0^\infty \frac{m_r}{\hbar^2 \pi L_z} [f_c(E) - f_v(E)] L(h\nu, E) dE \quad (\text{II.9})$$

Où  $h\nu$  est l'énergie de photon,  $n_r$  est l'indice de réfraction,  $c_0$  est la vitesse de la lumière et  $L_z$  : La largeur du puits.

$f_c$  et  $f_v$  sont respectivement, les fonctions de distribution de Fermi-Dirac pour les électrons de la bande de conduction et les trous de la bande de valence.

$m_r$  est la masse réduite qui s'exprime comme suit :

$$\frac{1}{m_r(E)} = \frac{1}{m_c(E)} + \frac{1}{m_v(E)} \quad (\text{II.10})$$

$P$  est le moment de matrice dipolaire qui est donné par :

$$|P|^2 = \frac{\hbar^2 E_G (E_G + \Delta)}{2m_c (E_G + \frac{2}{3}\Delta)} \quad (\text{III.11})$$

Où  $E_G$  est  $\Delta$  sont l'énergie du gap et l'énergie du couplage spin-orbite,  $m_c$  est la masse effective de conduction.

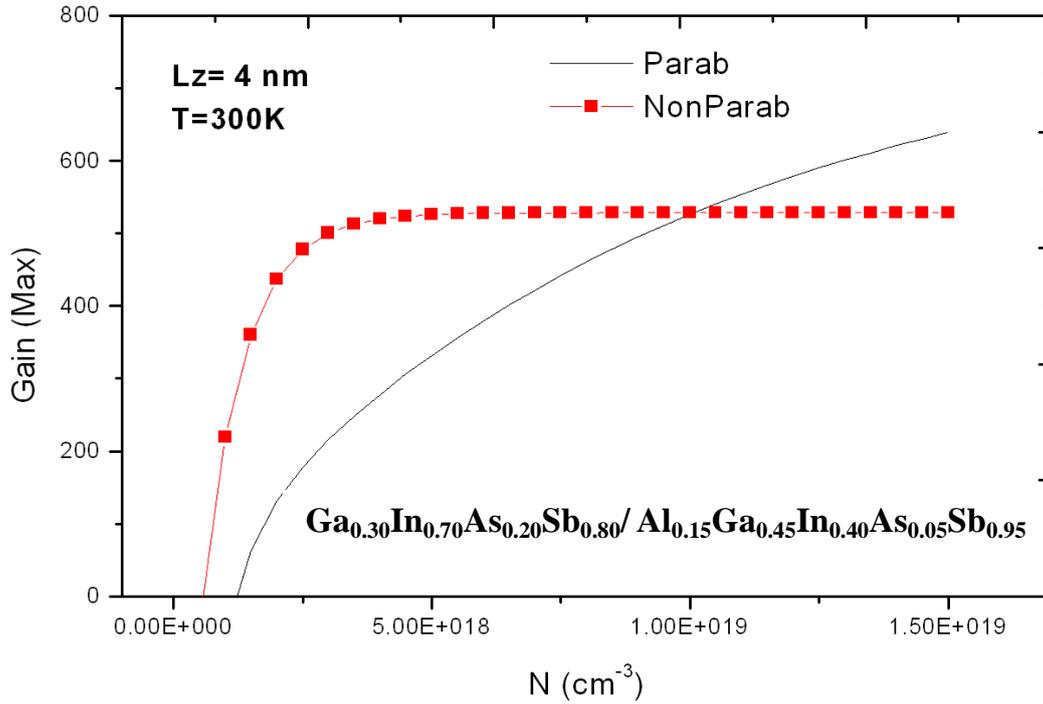
Le gain max est définit comme suit:

$$g_{\max} = g_0 \ln(N / N_{Tr}) \quad (\text{II.13})$$

Où  $N$  est la concentration des porteurs injectés,  $N_{Tr}$  est la concentration à la transparence et  $g_0$  est le coefficient de gain qui dépend de la structure.

Sur la figure II.18, nous montrons la variation du gain max parabolique et non-parabolique en fonction de la densité des porteurs injectés.

Nous remarquons que : pour le cas parabolique, le gain max augmente avec l'augmentation de la concentration des porteurs injectés. Par contre, pour le cas non-parabolique, le gain max augmente puis il se sature. D'autre part, la densité de seuil non parabolique est plus faible que la densité de seuil parabolique. Ceci conduit à une diminution de la densité de courant de seuil et augmentation du gain.



**Figure II.18** : Variation du gain max en fonction de la concentration des porteurs injectés pour les cas parabolique et non-parabolique.

### ➤ Densité de courant de seuil

Les expressions du courant de seuil  $J_{seuil}$  et la densité de porteurs  $N_{seuil}$  sont données par les équations suivantes:

$$J_{seuil} = eL_Z \frac{N_{seuil}}{\tau} \quad (\text{II.14})$$

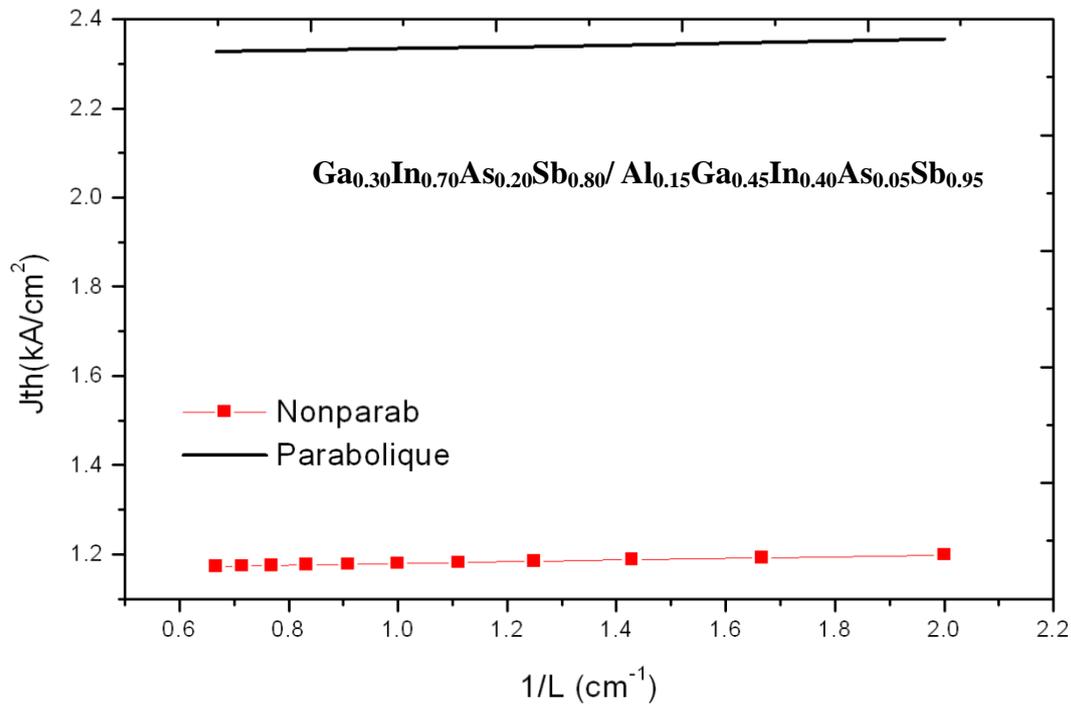
$$N_{seuil} = N_0 + \left(\Gamma \frac{dg}{dN}\right)^{-1} \alpha + \left(\Gamma \frac{dg}{dN} L\right)^{-1} \text{Ln}\left(\frac{1}{R}\right) \quad (\text{II.15})$$

Où :  $\tau$  est la durée de vie des porteurs,

$\alpha$  est le coefficient d'absorption et les pertes par diffusion.

$\frac{1}{L} \text{Ln}\left(\frac{1}{R}\right)$  sont les pertes par le miroir de la cavité.

La variation de la densité de courant de seuil laser en fonction de l'inverse de la largeur de la cavité est illustrée suivant la figure II.19. Nous montrons une diminution importante de l'ordre de 93.2% de la densité de courant de seuil non-parabolique.



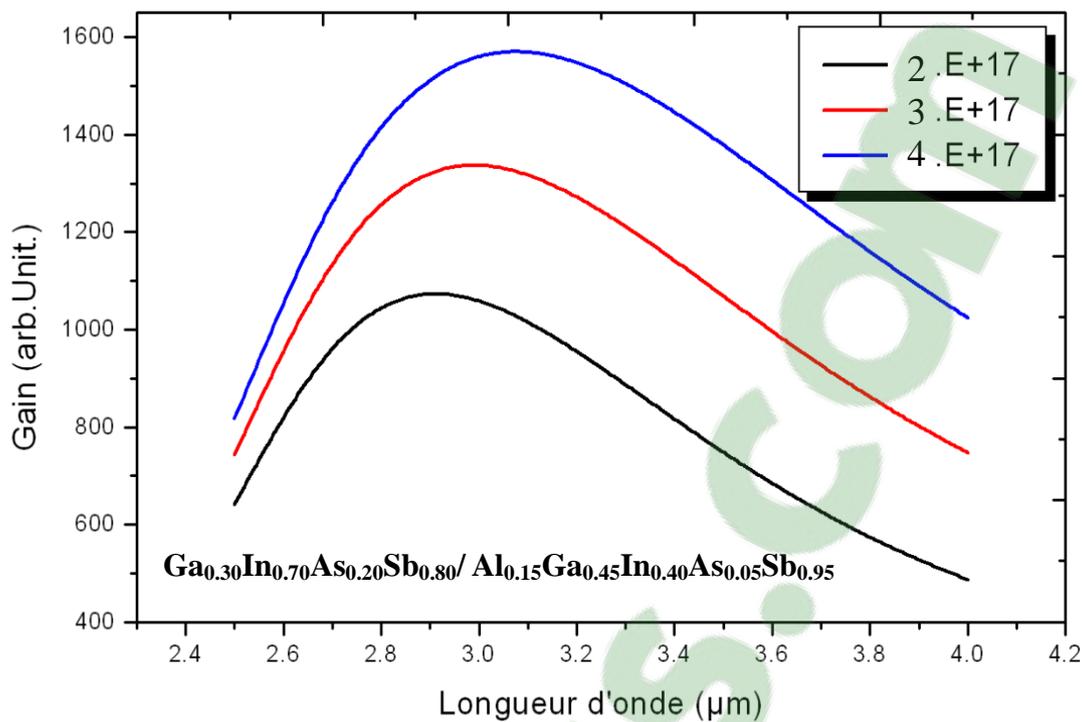
**Figure II.19** : Variation de la densité de courant de seuil en fonction de l'inverse de la largeur de la cavité.

### II.6.c. Calculs du gain du laser

On définit le gain modal de la structure comme étant le produit entre le facteur de confinement  $\Gamma$  et le gain maximal  $g_{\max}$  [15]:

$$G = \Gamma g_{\max} \quad (\text{II.12})$$

La figure II.20 montre la variation du gain en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentrations de porteurs injectés.



**Figure II.20** : Gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentrations de porteurs injectés.

Cette figure montre que le gain présente un pic et il augmente en augmentant la densité de porteurs injectés. La longueur d'onde maximale est de l'ordre de  $\lambda \approx 3.1 \mu\text{m}$

## II.7. Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons étudié les lasers à puits quantiques de type I à transition inter-bande à base du système  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ .

Nous avons déterminé la structure optimale du laser avec les concentrations d'alliage dans le puits et la barrière telles que :  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_{0.20}Sb_{0.80}/Al_{0.15}Ga_{0.45}In_{0.40}As_{0.05}Sb_{0.95}$ . Cette hétéro-structure est caractérisée par une faible contrainte bi-axiale de compression de l'ordre  $\Delta a/a = 0.72\%$  et un confinement des électrons et des trous  $\Delta E_C = 0.335 \text{ eV}$  et  $\Delta E_V = 0.167 \text{ eV}$ , respectivement.

L'étude de la non-parabolicité est primordiale pour l'étude d'optimisation du laser. Nous avons montré une influence importante de la non-parabolicité sur les paramètres de fonctionnement du laser et principalement sur la longueur d'onde d'émission laser.

Les effets de contrainte et de non-parabolicité provoquent une faible diminution des énergies de confinement et augmentation importante du gap ce qui se traduit par une diminution importante de la longueur d'onde d'émission et par conséquent un décalage vers les courtes longueurs d'onde qui se traduit par un décalage vers le bleu (blueshift).

Nous avons montré également que les effets de contrainte et de non-parabolicité sont désirables du fait qu'ils provoquent une diminution importante de la densité de courant de seuil laser et augmentation du gain optique. Cependant, ce résultat est compensé par la diminution de la longueur d'onde qui est indésirable du fait que notre objectif est d'atteindre la gamme la plus large possible du moyen infrarouge. La longueur d'onde maximale est  $\lambda = 3.1\mu\text{m}$  pour une structure à puits quantique de type I à base de  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_{0.20}Sb_{0.80}/Al_{0.15}Ga_{0.45}In_{0.40}As_{0.05}Sb_{0.95}$  avec une densité de courant de seuil de l'ordre  $0.083\text{kA/cm}^2$ .

Ces résultats limitent l'utilisation de ce laser dans le domaine  $2\mu\text{m}-3\mu\text{m}$  du moyen infrarouge, à cause principalement de la transition type I-type II de l'hétérostructure. Ceci est dû au fait que la longueur d'onde d'émission est dépendante de l'énergie du gap du matériau utilisé et qui est limitée par :

- La chimie : toutes les compositions d'alliages ne sont pas accessibles ;
- La contrainte:  $-2\% \leq \Delta a/a \leq +2\%$  ;
- Le type d'hétérostructure : il faut que l'hétérostructure soit de type I.

Pour améliorer les performances de ces lasers et améliorer la longueur d'onde d'émission, deux solutions sont possibles : soit on change de matériaux et on opte pour la filière des nitrures d'antimoniures ou bien on change de structure et il s'agit des lasers à cascade quantique.

## Références

---

- [1] Donati GP, Kaspi R and Malloy KJ, J. Appl. Phys. **93**, 1083, (2003).
- [2] Qian LQ and Wessels BW J. Vac. Sci. Technol. B 11, 1652, (1993).
- [3] A. N. Baranov, C. Fouillant, P. Grunberg, J. L. Lazzari, S. Gaillard and A. Joullié, Appl. Phys. Lett., **65**, 616, (1994).
- [4] G. W. Turner, et al., Applied Physics Letters, vol. **72**, pp. 876-878, (1998).
- [5] A.Salhi, Y. Rouillard, A. Perona, P. Grech, M. Garcia, C. Sirtoni, Semicond. Science Technol. **19**, 260-262, (2004).
- [6] Julie Angellier, David Barat, Guilhem Boissier, France Chevier, Pierre Grech, Yves Rouillard, Proc. SPIE, Novel In-Plane Semiconductor Lasers VI, vol. **6485**, B 64850, (2007).
- [7] J.G. Kim, L. Shterengas, R.U. Martinelli, G.L. Belenky, Appl. Phys. Letters **83**(10), 1926-1928, (2003).
- [8] L. Shterengas, et al., Applied Physics Letters, vol. **92**(17), 171111, (2008).
- [9] M. Grau, et al., Applied Physics Letters, vol. **87**(24), 241104, (2005).
- [10] T. Hosoda, G. Belenky, L. Shterengas, G. Kipshidze, M.V. Kisin, Appl. Phys. Letters **92**, 091106, (2008)
- [11] L. Shterengas, G. Belenky, T. Hosoda, G. Kipshidze, S. Suchalkin, Appl. Phys. Letters **93**, 011103, (2008)
- [12] Albert Schliesser, Nathalie Picqué, Theodor W. Hänsch, Nature Photonics, **6**, 440–449, (2012)
- [13] <http://www.astrosurf.com/luxorion/Documents/lidar.jpg>.
- [14] Les FRA s'équipent en contres-mesures infrarouge, portail de l'aéronautique, (2007).
- [15] E. Rosencher and B. Vinter, Optoélectronique, ed. Masson. 1998, Paris: Masson.

- [16] I. Vurgaftman, C. L. Felix, W. W. Bewley, D. W. Stokes, R. E. Bartolo and J. R. Meyer, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **359**, 489-503, (2001).
- [17] R.L. Anderson, *Solid-State Electron*, **5**, (1962).
- [18] J.G. Kim, L. Shterengas, R.U. Martinelli, G.L. Belenky, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 1926, (2003)
- [19] C. Mermelstein, M. Rattunde, J. Schmitz, S. Simanowski, R. Kiefer, M. Walther, J. Wagne, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 692, 365, (2002)
- [20]: I. Suemune, *IEEE J. Quantum Electron*, Vol. **27**, pp. 1149-1159, (1991)

## Chapitre III :

### Étude d'optimisation des lasers de type I à puits quantiques d'alliages Nitrures d'Antimoniures quaternaires/quaternaires

#### $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$

III.1. Introduction .....	54
III.2. Étude des propriétés des Nitrures d'Antimoniures .....	55
III.2.1. Étude des propriétés structurales .....	56
III.2.2. Étude des propriétés électroniques .....	56
III.2.3. Étude des propriétés de l'alliage $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}$ .....	58
III.2.4. Étude des propriétés de l'alliage $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ .....	61
III.2.5. Étude des propriétés de l'hétéro-structure $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y} /$ $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ .....	63
III.3. Étude d'optimisation du laser type I à base de $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}/$ $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ .....	68
III.3.1. Calculs de la longueur d'onde d'émission laser .....	68
III.3.2. Gain optique et densité de courant de seuil .....	69
III.4. Conclusion .....	71

### III.1. Introduction :

Les nitrures d'antimoniures dilués représentent une nouvelle famille de composés III-V qui présente des propriétés physiques intéressantes et d'une grande importance technologique. Il s'agit d'introduire une très faible proportion d'azote ( $\leq 2\%$ ) aux semi-conducteurs III-V afin d'améliorer les performances et les propriétés des lasers émettant à température ambiante dans le domaine spectral  $\lambda \geq 3\mu\text{m}$  du moyen infrarouge.

L'addition d'une faible quantité d'azote aux semi-conducteurs III-V provoque une diminution importante de l'énergie du gap de ces matériaux qui se traduit par une nette augmentation de la longueur d'onde d'émission [1].

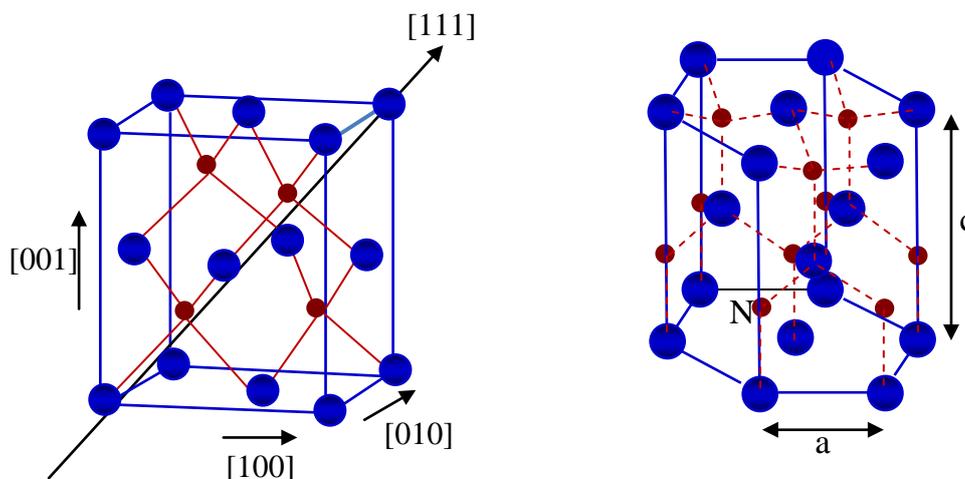
Dans ce chapitre, nous procédons à une étude d'optimisation des lasers de type I, à puits quantiques à base de matériaux dilués nitrures d'antimoniures :  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  et nous étudions les propriétés de bandes de ces alliages. Nous déterminons l'énergie de la bande interdite en fonction de la composition en azote ( $y \leq 2\%$ ) pour différentes compositions en indium pour l'alliage  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}$  et pour différentes compositions en aluminium pour l'alliage  $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ . Nous étudions également la variation de l'accord de maille avec le substrat et l'hétéro-structure à base du système  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  en étudiant la contrainte entre puits/barrière et le band offset.

## III.2. Étude des propriétés des Nitrures d'Antimoniures

Les nitrures d'antimoniures sont des matériaux qui associent les composés binaires à base des nitrures GaN, AlN, InN et les antimoniures GaSb, AlSb, InSb. Le concept étant de combiner les propriétés des nitrures qui sont à grand gap ( $0.64 \leq E_g$  (eV) à 300K [2]  $\leq 6.14$ ) qui correspond au domaine de longueurs d'onde ( $0.2 \leq \lambda$  ( $\mu\text{m}$ )  $\leq 1.9$ ) à celles des antimoniures qui sont à petit gap ( $0.17 \leq E_g$  (eV) à 300K [3]  $\leq 1.6$ ) correspondant à ( $0.8 \leq \lambda$  ( $\mu\text{m}$ )  $\leq 7.3$ ).

### III.2.1. Étude des propriétés structurales

Les composés III-N (GaN, AlN et InN) se cristallisent suivant la structure wurtzite (hexagonale) ou selon la structure cubique (zinc blende) dont la phase la plus stable est la phase wurtzite (figure III. 1). Elle est constituée de deux sous-réseaux hexagonaux compacts décalés selon l'axe c. L'un de ces sous-réseaux est constitué d'atomes de la colonne III (Ga ou Al ou In) alors que l'autre est constitué d'atomes d'azote (figure III.1).



**Figure III.1** : Structure cristalline des nitrures GaN, InN et AlN. À droite structure cubique (Wurtzite), à gauche la structure hexagonale (Zinc blende)

Contrairement à la structure zinc blende qui est décrite par un seul paramètre de maille  $a$ , les paramètres qui caractérisent la structure wurtzite sont : le paramètre  $a$  suivant le plan (0001) et le paramètre  $c$  qui correspond à la hauteur de la maille suivant l'axe [0001].

**Tableau III.1. : Les paramètres physiques des nitrures (InN, GaN, AlN) à 300K**

	Phase cubique		
	InN	GaN	AlN
Eg (eV)	0.6 <sup>(a)</sup>	3.24 <sup>(b)</sup>	6.2 <sup>(b)</sup>
a (Å)	4.98 <sup>(b)</sup>	4.50 <sup>(b)</sup>	4.38 <sup>(b)</sup>
m <sub>e</sub> * (m <sub>o</sub> )	0.05 <sup>(c)</sup>	0.19 <sup>(c)</sup>	0.32 <sup>(c)</sup>
m <sub>lh</sub> (m <sub>o</sub> )	0.30 <sup>(b)</sup>	0.22 <sup>(b)</sup>	0.30 <sup>(b)</sup>
m <sub>hh</sub> (m <sub>o</sub> )	1.83 <sup>(b)</sup>	1.27 <sup>(b)</sup>	1.83 <sup>(b)</sup>
m <sub>so</sub> (m <sub>o</sub> )	0.3 <sup>(b)</sup>	0.29 <sup>(b)</sup>	0.47 <sup>(b)</sup>
E <sub>χ</sub> (eV)	5.8 <sup>[d]</sup>	4.1 <sup>[e]</sup>	0.6 <sup>[f]</sup>

	Phase wurtzite		
	InN	GaN	AlN
Eg (eV)	0.64 <sup>(g)</sup>	3.43 <sup>(b)</sup>	6.14 <sup>(b)</sup>
a (Å)	3.533 <sup>(h)</sup>	3.189 <sup>(h)</sup>	3.112 <sup>(h)</sup>
c (Å)	5.693 <sup>(h)</sup>	5.185 <sup>(h)</sup>	4.982 <sup>(h)</sup>
m <sub>e</sub> * (m <sub>o</sub> )	0.07 <sup>(i)</sup>	0.20 <sup>(b)</sup>	0.32 <sup>(b)</sup>

(a) J. Schörmann, D. J. As, K. Lischka, P. Schley, R. Goldhahn, S. F. Li, L. Loeffler, M. Hetterich, and H. Kalt, Appl. Phys. Lett. **89**, 261903, (2006).

(b) I. Vurgaftman and J. R. Meyer, J. Appl. Phys. **94**, 3675, (2003).

(c) P. Rinke, M. Winkelkemper, A. Qteish, D. Bimberg, J. Neugebauer, and M. Scheffler, Phys. Rev. B **77**, 075202, (2008).

(d) Wladek Walukiewicz, Kin M. Yu, Sonny X. Li, Rebecca E. Jones, Joel W. Ager III, Eugene E. Haller, Hai Lu, William J. Schaff, E-MRS Fall Meeting, Symposium A (2005).

(e) J. I. Pankove and H. Schade, Appl. Phys. Lett. **25**, 53-55 (1974).

(f) V. M. Bermudez, T.M. Jung, K. Doverspike, and A. E. Wickenden, J. Appl. Phys. **79** (1996) 110-119.

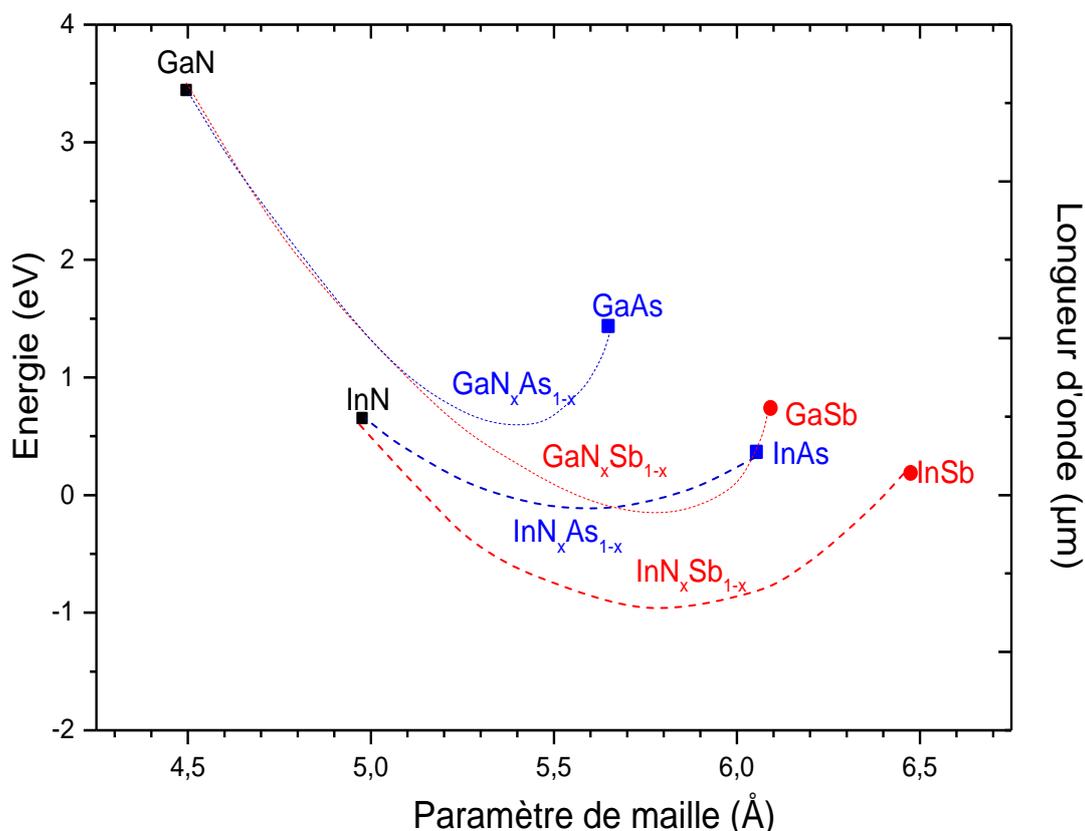
(g) J. Wu, W. Walukiewicz, W. Shan, K. M. Yu, J. W. Ager, S. X. Li, E. E. Haller, H. Lu, and W. J. Schaff, J. Appl. Phys. **94**, 4457, (2003).

(h) M. E. Levinshtein, S. L. Rumyantsev, and M. S. Shur, Wiley, New York, **20** (d), (2000).

(i) J. Wu, W. Walukiewicz, W. Shan, K. M. Yu, J. W. Ager, E. E. Haller, H. Lu, and W. J. Schaff, Phys. Rev. B **66**, 201403, (2002).

### III.2.2. Étude des propriétés électroniques

Les semi-conducteurs III-N sont caractérisés par un gap direct où le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se trouve au point  $\Gamma$ . Ils présentent une structure à large bande interdite qui est, à 300K, de l'ordre de 6.14 eV pour l'AlN et de 3.43 eV pour le GaN [2]. La figure III.2 montre la variation du gap en fonction du paramètre de maille des différents binaires III-N et leurs alliages.



**Figure III.2** : Variation de l'énergie en fonction du paramètre de maille des différents alliages III-V-N

L'introduction d'une faible proportion d'azote aux semi-conducteurs III-V provoque une forte courbure de l'énergie du gap aboutissant à une diminution de l'énergie comparée à celle des binaires constituant l'alliage.

La figure III.2 montre que la diminution du gap dans les nitrures d'antimoniures dilués est plus importante que dans les nitrures d'arséniures ( $InN_xAs_{1-x}$ ,  $GaN_xAs_{1-x}$ ). Ceci est dû d'une part à la différence des rayons atomiques, les atomes ne sont pas les mêmes et d'autre part à la grande différence d'électronégativité qui existe entre l'azote et l'antimoine.

La variation de l'énergie du gap des alliages ternaires est calculée à partir de la relation de Végard :

$$E_G(A_{1-x}B_xC) = (1-x)E_G(AC) + xE_G(BC) - x(1-x)c \quad [eV] \quad \text{III.1}$$

Où  $c$  : est le coefficient de courbure qui fait que la variation de l'énergie du gap  $E_G$  en fonction de la concentration d'alliage est non linéaire. On donne suivant le tableau III.2, le coefficient de courbure des nitrures et des nitrures d'antimoniures.

**Tableau III.2 : Le coefficient de courbure des nitrures et des nitrures d'antimoniures**

	AlGaN	GaInN	AlInN	GaNSb	InNSb
$c$ (eV)	0.6 <sup>a</sup>	1.4 <sup>a</sup>	5.0 <sup>a</sup>	17 <sup>b</sup>	8 <sup>c</sup>

a: Junqiao Wu, Journal of Applied Physics, **106**, 011101, (2009);

b: A. Belabbes M. Ferhat, Applied Physics Letters, **88**, 152109, (2006);

c: B. N. Murdina and A. R. Adams et al., Applied Physics Letters, Vol. **81**, Num 2, (2002).

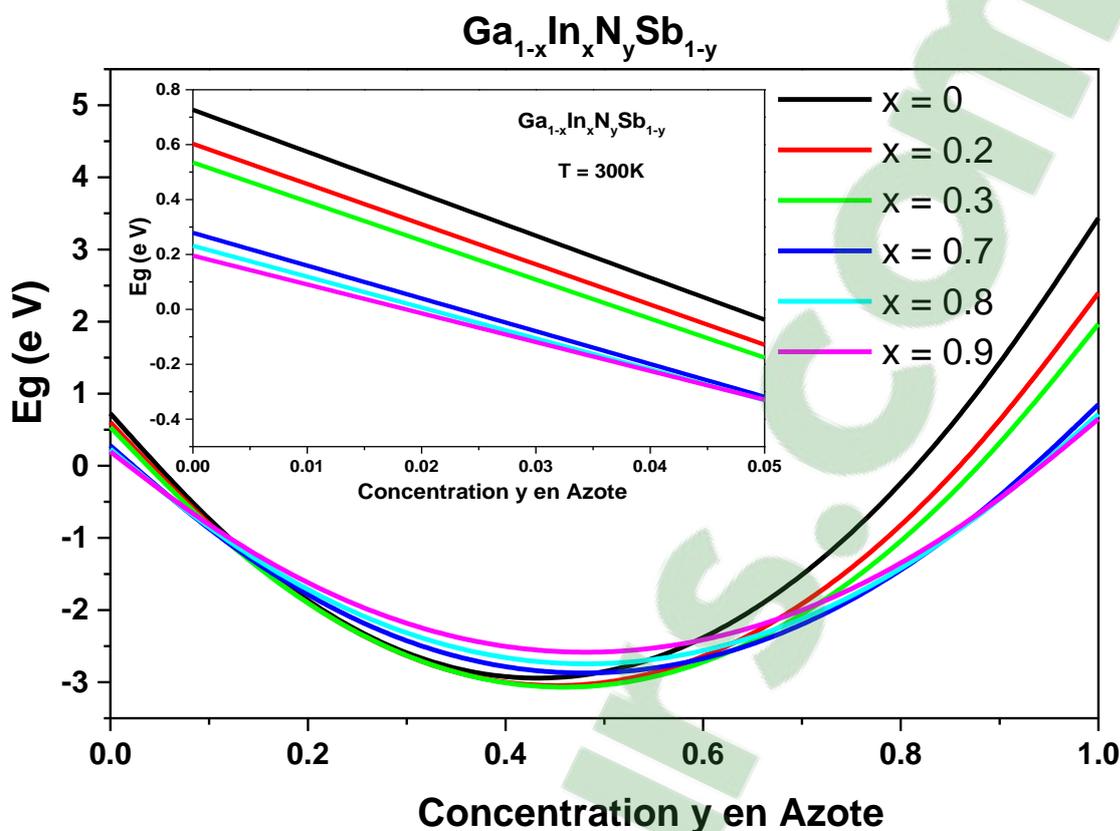
### III.2.3. Étude des propriétés de l'alliage $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}$

#### ➤ Étude de la structure de bande

Les alliages quaternaires à nitrure d'antimoniure sont très prometteurs pour les applications dans le moyen infrarouge de la gamme  $2\mu\text{m}$ - $5\mu\text{m}$ . Ceci est dû à la possibilité d'ajuster l'énergie du gap en jouant sur la concentration en indium et en azote en faible proportion. Le calcul de la variation de l'énergie en fonction de la concentration en azote est représenté suivant la figure III.3. Cette variation est calculée par cette équation :

$$E_{G(Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y})} = xy E_{G(InN)} + y(1-x) E_{G(GaN)} + x(1-y) E_{G(InSb)} + (1-x)(1-y) E_{G(GaSb)} - y(1-x) \left[ xc_{Ga_{1-x}In_xN} + (1-y)c_{Ga_{1-x}In_xSb} \right] - x(1-y) \left[ (1-x)c_{GaN_ySb_{1-y}} + yc_{InN_ySb_{1-y}} \right] \quad \text{(III.2)}$$

c : est le coefficient de courbure des alliages ternaires constituant le quaternaire  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}$  (tableau III.3).



**Figure III.3 :** Variation de l'énergie du gap de l'alliage  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}$  en fonction de la concentration en Azote pour différentes concentrations en Indium

L'alliage  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}$  est utilisé pour le puits. Son énergie du gap représente un fort bowing qui est dû d'une part au désordre d'alliage (effet de contrainte dû à la différence des paramètres de mailles) et d'autre part, au désordre structural qui est dû au fait de combiner les nitrures qui sont caractérisés par une structure wurtzite avec les antimoniures qui sont caractérisés par une structure cubique.

D'après la figure III.3, on remarque aussi que l'énergie  $E_G$  diminue quand on augmente la concentration en azote et par conséquent la longueur d'onde augmente. Cependant, à cause de l'instabilité chimique de l'azote et de l'indium, on doit travailler pour des concentrations très faibles en In et en N :  $x \leq 10\%$  et  $y \leq 2\%$  afin de ne pas avoir des défauts qui altèrent la qualité chimique de la couche.

➤ Étude de l'accord de maille avec le substrat

La variation de l'accord de maille avec le substrat de l'alliage  $Ga_{1-x}In_xAs_ySb_{1-y}$  est calculée par l'équation III. 3 et elle est représentée suivant la figure III.4.

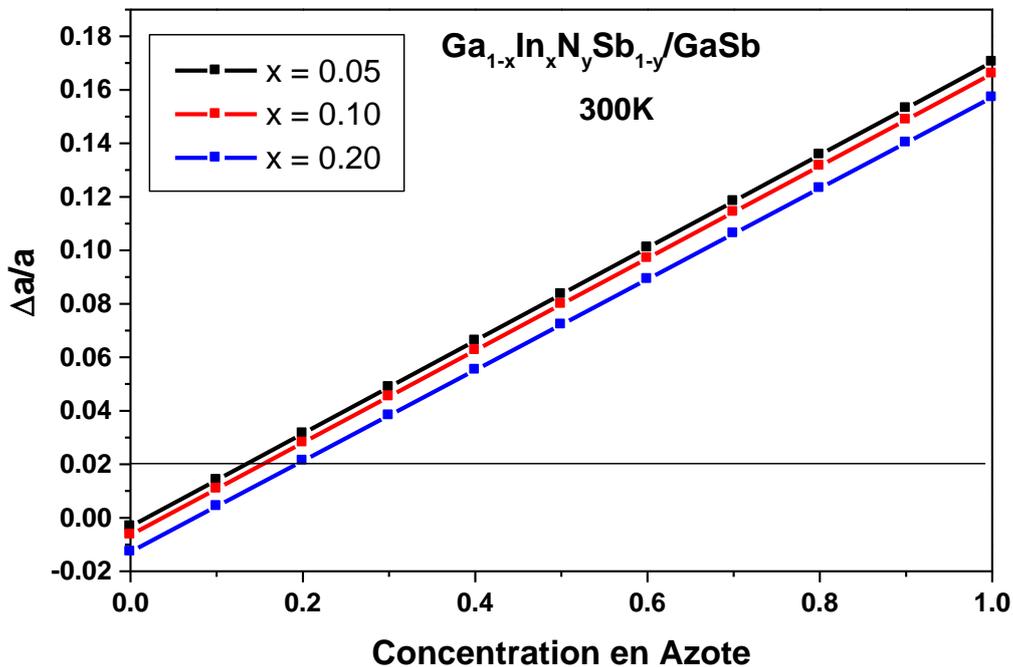
$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{a_{Substrat} - a_{Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}}}{a_{Substrat}} \quad (III.3)$$

Tel que :

$$a_{Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}} = xy a_{InN} + y(1-x)a_{GaN} + x(1-y)a_{InSb} + (1-x)(1-y)a_{GaSb} \quad (III.4)$$

Pour éviter la rupture du matériau, le désaccord de maille ( $\Delta a/a$ ) doit être inférieur à 2%. Donc, l'alliage  $Ga_xIn_{1-x}N_ySb_{1-y}$  est accordé en maille avec le substrat pour les très faibles concentrations en Azote  $y \leq 2\%$  et pour les faibles concentrations en indium.

D'après la figure III.4, on remarque aussi que pour les faibles concentrations en Indium et en azote, le matériau est comprimé pour s'adapter au substrat GaSb.



**Figure III.4** : Variation de l'accord de maille avec le substrat GaSb de l'alliage  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}$  à 300K

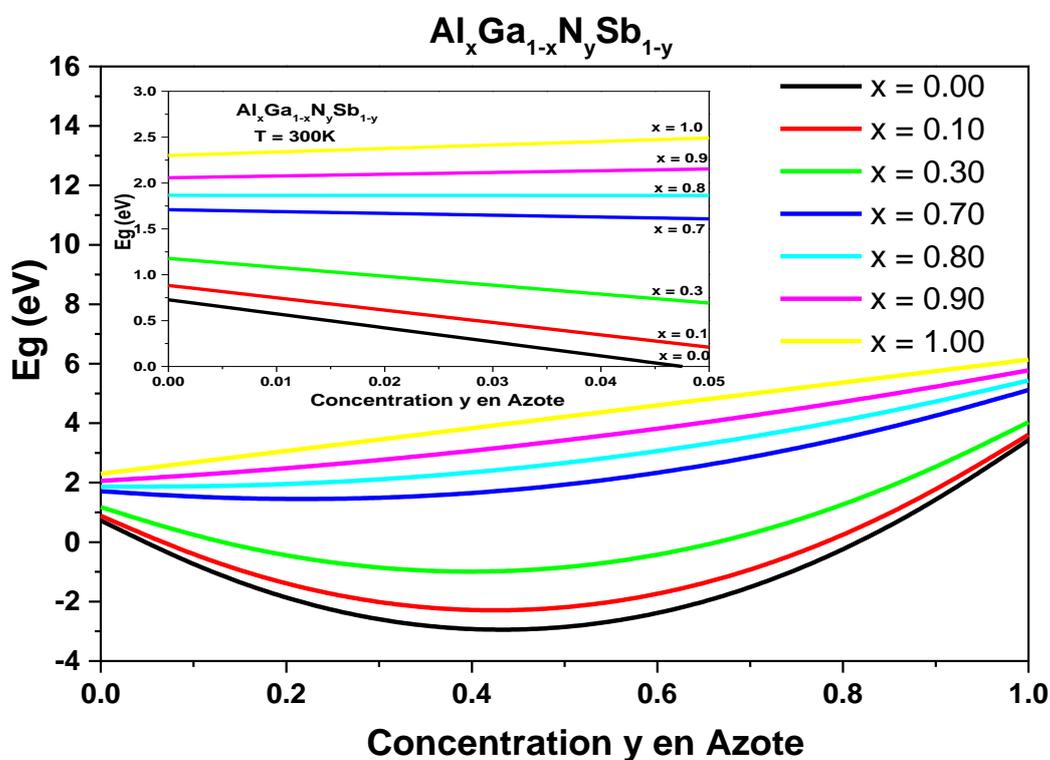
### III.2.4. Étude des propriétés de l'alliage $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$

#### ➤ Étude de la structure de bande

L'alliage  $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  est utilisé pour la barrière. La variation de l'énergie du gap de cet alliage est calculée à partir de cette équation :

$$E_{G(Ga_{1-x}Al_xN_ySb_{1-y})} = xy E_{G(AIN)} + y(1-x) E_{G(GaN)} + x(1-y) E_{G(AlSb)} + (1-x)(1-y) E_{G(GaSb)} - y(1-x) \left[ xc_{Ga_{1-x}Al_xN} + (1-y)c_{Ga_{1-x}Al_xSb} \right] - x(1-y) \left[ (1-x)c_{GaN_ySb_{1-y}} + yc_{AlN_ySb_{1-y}} \right] \quad (III.5)$$

$c$  est le coefficient de courbure des alliages ternaires constituant le quaternaire  $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  (tableau III.3).



**Figure III.5 :** Variation de l'énergie du gap de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  en fonction de la concentration en Azote pour différentes concentrations en Al

À partir de cette variation, on remarque que : quand on augmente la concentration en aluminium, l'énergie  $E_G$  augmente et par conséquent le band offset augmente. Donc, le

confinement des porteurs est amélioré. Par contre, on est toujours limité chimiquement, car la concentration en azote doit être inférieure à 2%.

➤ Étude de l'accord de maille avec le substrat

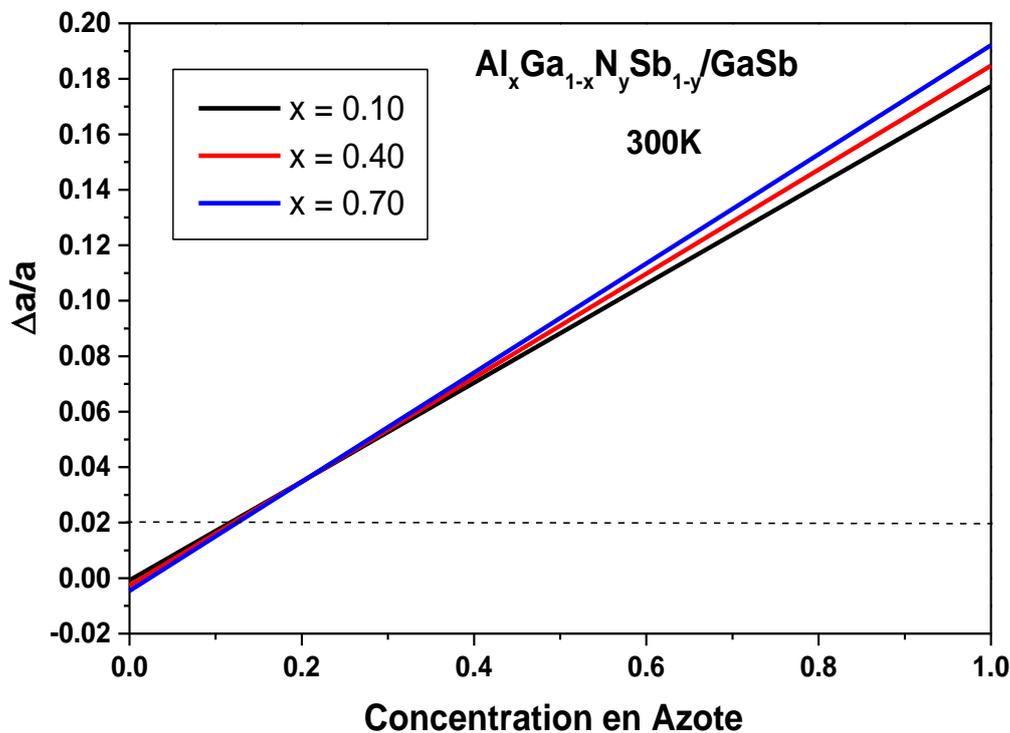
La variation de l'accord de maille avec le substrat de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  est calculée par cette équation :

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{a_{Substrat} - a_{Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}}}{a_{Substrat}} \quad (III.6)$$

Tel que :

$$a_{Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}} = xy a_{AlN} + y(1-x) a_{GaN} + x(1-y) a_{AlSb} + (1-x)(1-y) a_{GaSb} \quad (III.7)$$

Sur la figure III.6, on remarque que l'alliage  $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  est en bon accord de maille avec le substrat GaSb pour les faibles concentrations en azote  $y \leq 1\%$ . L'aluminium n'influe pas vraiment sur la contrainte et l'alliage  $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  représente une contrainte de compression par rapport au substrat GaSb.



**Figure III.6:** Variation de l'accord de maille avec le substrat GaSb de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  à 300K

### III.2.5. Étude des propriétés de l'hétérostructure $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$

L'hétéro-structure appropriée pour le laser à base du système  $Ga_xIn_{1-x}N_ySb_{1-y} / Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  est basée sur le bon choix des compositions de ces alliages. Ceci nous impose à choisir les concentrations d'alliages de telle manière que :

- L'hétéro-structure soit de type I ;
- Un confinement adéquat des électrons et des trous ;
- La contrainte entre le puits et la barrière doit être inférieure à 2%.

#### ➤ Étude du désalignement de bande à l'interface ou "band-offset"

Pour calculer le band offset ( $\Delta E_c$  et  $\Delta E_v$ ) de l'hétéro-structure  $Ga_xIn_{1-x}N_ySb_{1-y} / Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ , nous avons utilisé les équations suivantes :

$$\Delta E_c = e\chi_{barrière} - e\chi_{puits} \quad (III.8)$$

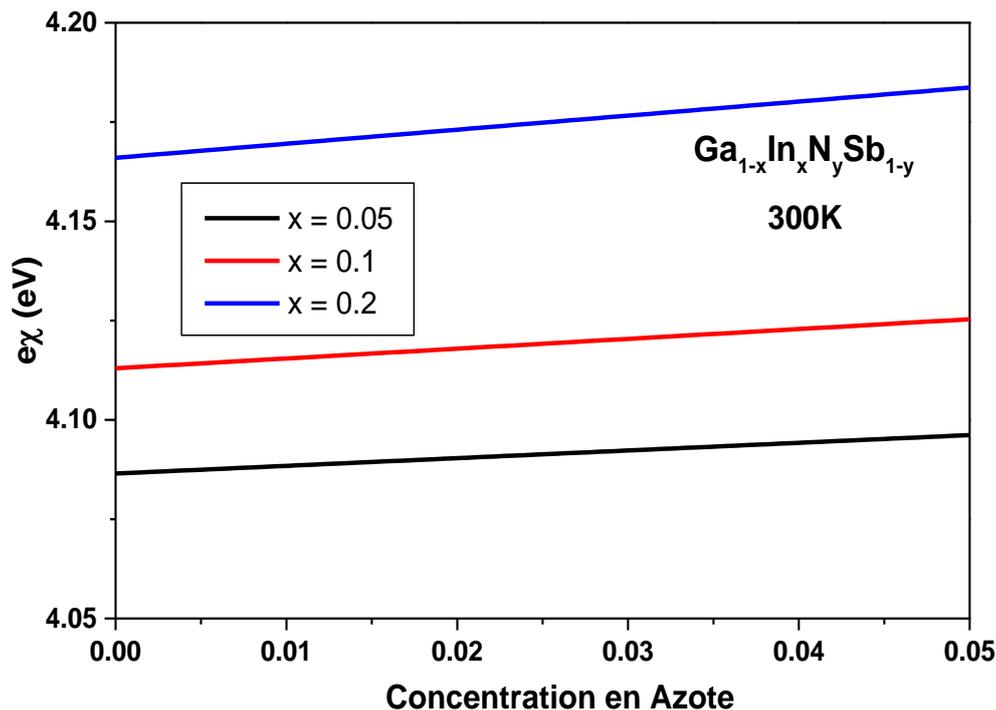
$$\Delta E_v = (e\chi_{barrière} + E_{G(barrière)}) - (e\chi_{puits} + E_{G(puits)}) \quad (III.9)$$

$e\chi_{puits}$  et  $e\chi_{barrière}$  sont les affinités électroniques du puits  $Ga_xIn_{1-x}N_ySb_{1-y}$  et de la barrière  $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ , tel que :

$$e\chi_{Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}} = xy e\chi_{InN} + y(1-x)e\chi_{GaN} + x(1-y)e\chi_{InSb} + (1-x)(1-y)e\chi_{GaSb} \quad (III.10)$$

$$e\chi_{Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}} = xy e\chi_{AlN} + y(1-x)e\chi_{GaN} + x(1-y)e\chi_{AlSb} + (1-x)(1-y)e\chi_{GaSb} \quad (III.11)$$

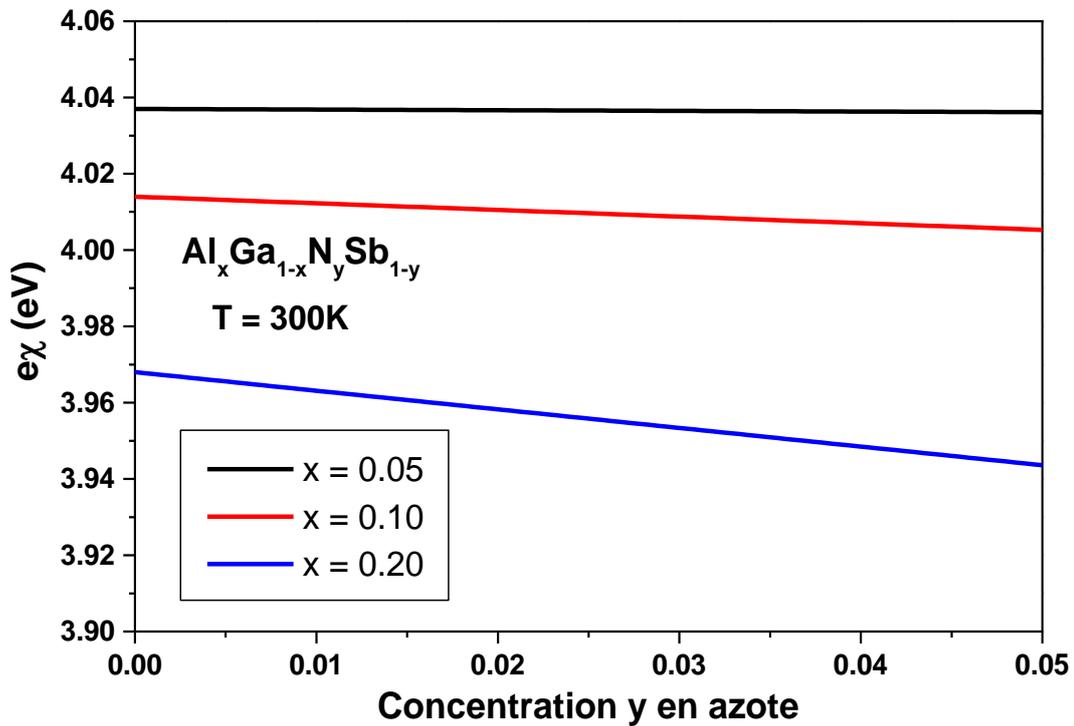
Sur la figure III.7, nous montrons la variation de l'affinité électronique de l'alliage  $Ga_xIn_{1-x}N_ySb_{1-y}$  en fonction de la composition en Azote  $z \leq 5\%$  pour différentes compositions en indium.



**Figure III.7:** Variation de l'affinité électronique de l'alliage  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}$  en fonction de la concentration en azote  $z \leq 5\%$  pour différentes composition en indium

La figure III.7 montre que l'affinité électronique du puits  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}$  augmente nettement avec la concentration en indium. Cependant, l'indium doit être introduit en faible proportion pour des raisons chimiques ( $x \leq 10\%$ ).

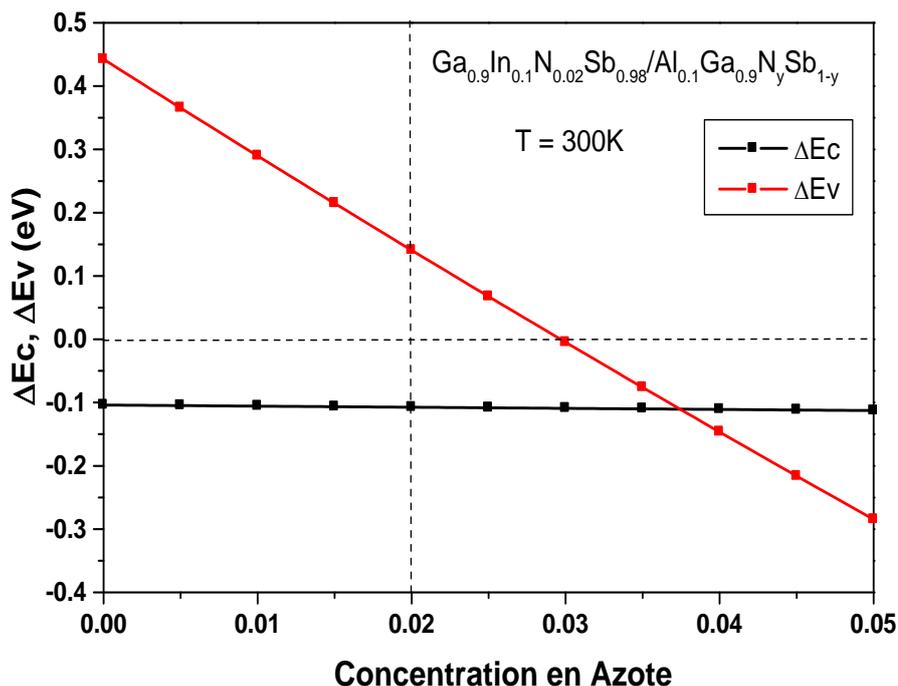
Pour avoir un bon confinement des porteurs, il faut que l'affinité électronique du puits soit plus grande que l'affinité électronique de la barrière. Sur la figure III.8, nous montrons la variation de l'affinité électronique de la barrière  $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  en fonction de la concentration en azote  $z \leq 5\%$  pour différentes compositions en aluminium.



**Figure III.8:** Variation de l'affinité électronique de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  en fonction de la concentration en azote  $z \leq 5\%$  pour différentes composition en aluminium

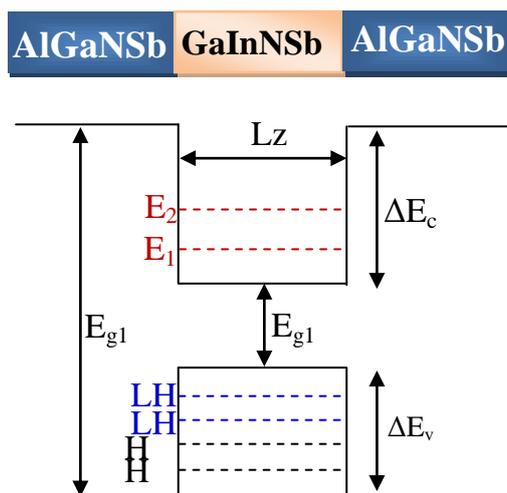
Cette figure montre que l'affinité électronique de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  diminue clairement quand on augmente la concentration en aluminium. Donc, pour avoir un bon confinement, il faut augmenter la concentration en aluminium dans l'alliage  $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  et augmenter la concentration en indium dans l'alliage  $Ga_xIn_{1-x}N_ySb_{1-y}$  tout en respectant les concentrations limitées chimiquement.

Après avoir fait l'étude des affinités électroniques, nous avons calculé le band offset ( $\Delta E_C$  et  $\Delta E_V$ ) de l'hétéro-structure  $Ga_xIn_{1-x}N_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ , afin de déterminer les concentrations adéquates pour avoir une hétérostructure de type I.



**Figure III.9:** Variation de  $\Delta E_C$  et de  $\Delta E_V$  de l'hétérostructure  $Al_{0.1}Ga_{0.9}N_ySb_{1-y}/Ga_{0.9}In_{0.1}N_{0.1}Sb_{0.9}$  en fonction de la concentration en azote  $z \leq 5\%$

À partir de ce graphe, on remarque que pour ( $0 \leq y \leq 0.02$ ) dans l'alliage  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-x}$ , l'hétéro-structure  $Ga_{0.9}In_{0.1}N_{0.1}Sb_{0.9}/Al_{0.1}Ga_{0.9}N_ySb_{1-y}$  présente une structure de type I. on remarque également que le confinement des trous ( $\Delta E_V$ ) diminue fortement avec l'augmentation de la concentration en N.



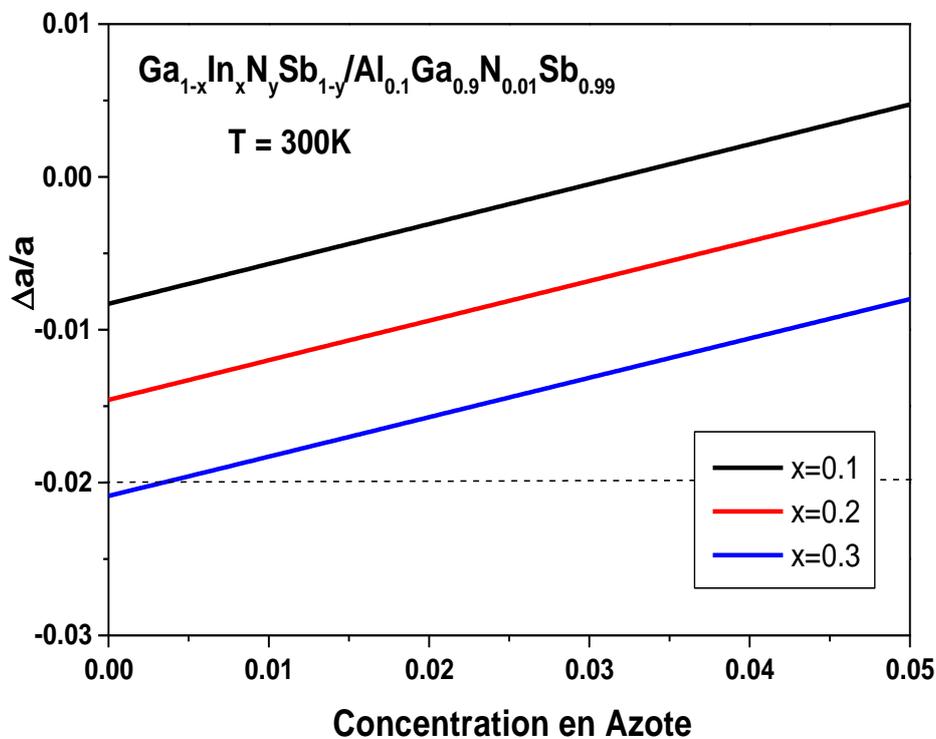
*Hétérostructure type I à base de  $Ga_{0.9}In_{0.1}N_{0.1}Sb_{0.9}/Al_{0.1}Ga_{0.9}N_ySb_{1-y}$  en montrant les énergies de confinement pour un puits détendu*

➤ Étude des effets de contrainte avec le substrat

Nous avons étudié la contrainte entre le puits  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}$  et la barrière  $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ . Le désaccord en maille et calculé à partir de cette équation :

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{a_{barrière} - a_{puits}}{a_{barrière}} \quad (III.12)$$

Cette variation est illustrée suivant la figure III.10. Pour les faibles concentrations en azote ( $0 \leq y \leq 5\%$ ), la contrainte est inférieure à 2% et pour 0.1, le puits  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}$  est détendu pour s'adapter à la barrière  $Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ .



**Figure III.10:** Variation de  $\Delta a/a$  de l'hétérostructure  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}/Al_{0.1}Ga_{0.9}N_{0.01}Sb_{0.99}$  en fonction de la concentration en azote  $z \leq 5\%$  pour différentes concentrations en azote

Après notre étude sur la contrainte et le band offset de l'hétéro-structure à base du système  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ , nous pouvons déterminer les concentrations d'alliages de l'hétéro-structure appropriée du laser. Deux structures sont possibles :

l'hétérostructure :  $Ga_{0,9}In_{0,1}N_{0,02}Sb_{0,98}/Al_{0,1}Ga_{0,9}N_{0,01}Sb_{0,99}$  et l'hétérostructure  $Ga_{0,9}In_{0,1}N_{0,01}Sb_{0,99}/Al_{0,1}Ga_{0,9}N_{0,01}Sb_{0,99}$ .

### III.3. Étude d'optimisation du laser type I à base de $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$

Dans cette partie, nous procédons à une étude théorique d'optimisation des paramètres de fonctionnement du laser de type I à base de nitrures d'antimoniures dilués du système  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ . Nous utilisons le modèle  $kP$  [4] basé sur l'Hamiltonien [8x8] pour une structure contrainte de type zinc blende en incluant les effets d'interaction entre le niveau le plus bas de la bande de conduction et les trois niveaux les plus haut de la bande de valence : trous lourds (HH), trous légers (LH) et spin-orbit (SO).

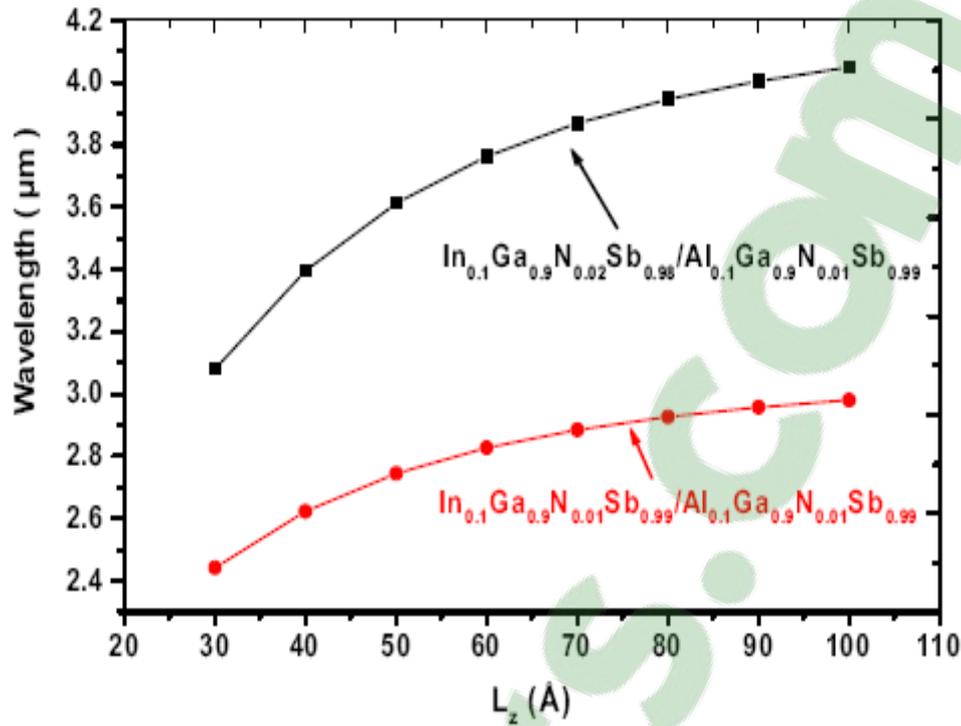
#### III.3.1. Calculs de la longueur d'onde d'émission laser

La longueur d'onde du laser est déterminée par l'équation III.13, elle dépend d'une part de la largeur du puits  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}$  et d'autre part de la composition en Azote.

$$\lambda = \frac{1.24}{E_G + E_{Cn} + E_{Vn}} \quad (\text{III.13})$$

Nous montrons sur la figure III.11, la variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour deux concentrations différentes en azote dans les structures lasers de type I à base du système :  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ .

On remarque que l'addition d'une faible proportion d'azote à l'alliage  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}$  influe fortement sur la longueur d'onde du laser. Pour une largeur du puits  $L_z = 100\text{\AA}$ , l'hétérostructure  $Ga_{0,9}In_{0,1}N_{0,02}Sb_{0,98}/Al_{0,1}Ga_{0,9}N_{0,01}Sb_{0,99}$  permet d'atteindre  $4\mu\text{m}$  alors que pour la même largeur du puits, l'hétérostructure  $Ga_{0,9}In_{0,1}N_{0,02}Sb_{0,98}/Al_{0,1}Ga_{0,9}N_{0,01}Sb_{0,99}$  permet l'émission jusqu'à  $2.85\mu\text{m}$ .



**Figure III.11** : Longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour deux concentrations différentes en azote dans les structures lasers de type I à base du système :  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  [5]

### III.3.2. Gain optique et densité de courant de seuil

Le gain optique est donné par l'équation suivante [6] :

$$g(h\nu) = \frac{n_r}{2c_0} \frac{\pi}{\varepsilon_0 h \nu} \left[ \frac{e}{m_0} \right]^2 \left| \frac{m_0 P}{\hbar} \right|^2 \int_0^\infty \frac{m_r}{\hbar^2 \pi L_z} [f_c(E) - f_v(E)] L(h\nu, E) dE \quad (\text{III.14})$$

Où  $h\nu$  est l'énergie de photon,  $n_r$  est l'indice de réfraction,  $c_0$  est la vitesse de la lumière et  $L_z$  : La largeur du puits.

$f_c$  et  $f_v$  sont respectivement, les fonctions de distribution de Fermi-Dirac pour les électrons de la bande de conduction et les trous de la bande de valence.

$m_r$  est la masse réduite et  $P$  est le moment de matrice dipolaire qui est donné par :

$$|P|^2 = \frac{\hbar^2 E_G (E_G + \Delta)}{2m_c (E_G + \frac{2}{3}\Delta)} \quad (\text{III.15})$$

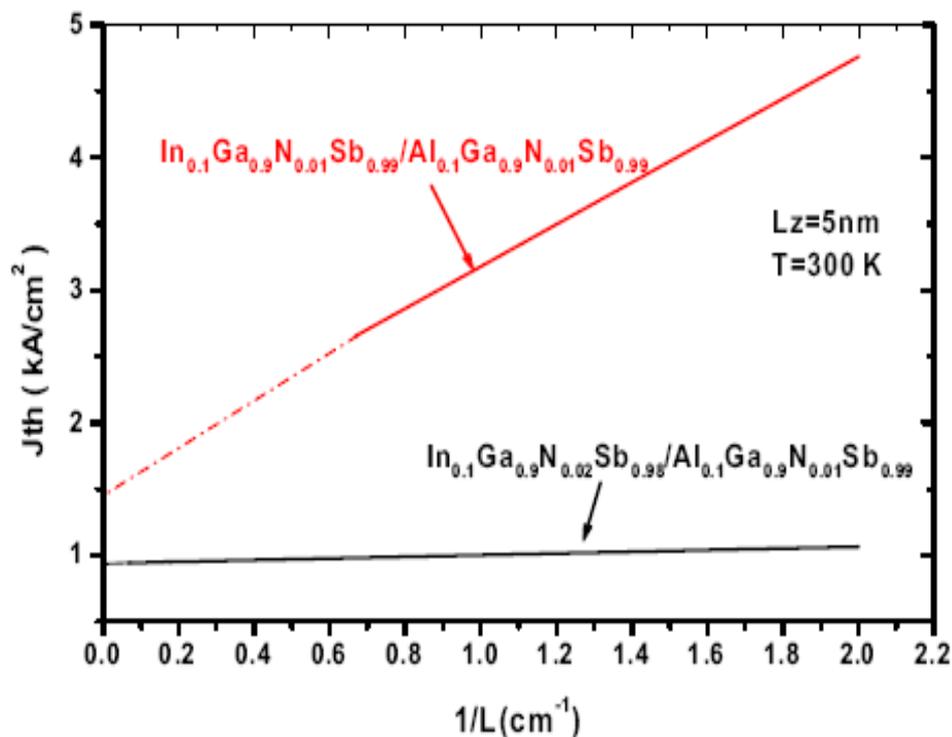
Où  $E_G$  est  $\Delta$  sont l'énergie du gap et l'énergie du couplage spin-orbite,  $m_c$  est la masse effective de conduction.

La densité de courant de seuil est donnée par cette équation : [7]

$$J_{th} = \frac{eL_z}{\tau} \left\{ N_0 + \left( \Gamma \frac{dg}{dN} \right)^{-1} \cdot \alpha + \left( \Gamma \frac{dg}{dN} L \right)^{-1} \cdot \ln \left( \frac{1}{R} \right) \right\} \quad (\text{III.16})$$

Où  $\tau$ : est la durée de vie des porteurs,  $N_0$  est la concentration de transparence des porteurs,  $R$  est la réflexion par la cavité,  $\Gamma$  et  $\frac{dg}{dN}$  sont respectivement le facteur de confinement et le gain différentiel,  $\alpha$  correspond aux pertes par absorption et par diffusion.  $L$  : est la largeur de la cavité est  $\frac{1}{L} \ln \left( \frac{1}{R} \right)$  sont les pertes par le miroir de la cavité.

En introduisant de l'azote de 0.01 à 0.02 dans le puits quantique  $Ga_{0.9}In_{0.1}N_ySb_{1-y}$ , on montre qu'on améliore nettement les paramètres du laser tels que la densité de courant de seuil et le gain du laser. Sur la figure III.12, on montre une réduction de 70% pour la densité de courant de seuil et une augmentation de 20% pour le gain optique du laser. Ces deux effets proviennent du fait que l'addition d'une faible proportion d'azote provoque une diminution importante de l'énergie  $E_G$  et de la masse effective qui induit une diminution du courant injecté et par conséquent une réduction importante de la densité de transparence des porteurs  $N_0$



**Figure III.12** : Densité de courant de seuil en fonction de l'inverse de la largeur de la cavité pour deux concentrations différentes d'azote dans les structures lasers de type I à base du système :  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$  [5]

Ces résultats montrent le rôle prépondérant de l'azote sur les calculs du gain et du courant de seuil établi à température ambiante. Des résultats assez similaires ont été obtenus par Aggarwal et al. [7] où ils ont comparé les calculs du courant de seuil pour un laser de type I à puits quantique des systèmes : ZnCdSe/ZnSe et GaAs/AlGaAs.

## II.4. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons effectué une étude d'optimisation du laser de type I à base de nitrures d'antimoniures dilués  $Ga_xIn_{1-x}N_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ . Nous avons démontré que les paramètres du laser varient clairement avec la concentration en azote pour  $y \leq 2\%$ .

Nous avons déterminé la structure optimale du laser avec une concentration maximale en azote  $y = 2\%$  dans le puits  $Ga_xIn_{1-x}N_ySb_{1-y}$ .

La plus grande longueur d'onde obtenue est de  $4\mu\text{m}$  pour une structure à puits quantiques de type I à base de  $Ga_{0.9}In_{0.1}N_{0.02}Sb_{0.98}/Al_{0.1}Ga_{0.9}N_{0.01}Sb_{0.99}$ , avec un gain modal de l'ordre de  $250\text{ Cm}^{-1}$  et un faible courant de seuil de  $0.9\text{ kA/cm}^2$ .

Ces résultats montrent que le laser de type I à base de  $Ga_{0.9}In_{0.1}N_{0.02}Sb_{0.98}/Al_{0.1}Ga_{0.9}N_{0.01}Sb_{0.99}$  peut être utilisé dans les applications dans le domaine  $3\mu\text{m}-4\mu\text{m}$  du moyen infrarouge. Cependant, pour améliorer la longueur d'onde d'émission et aller au-delà de  $4\mu\text{m}$ , nous devons concevoir des structures plus sophistiquées et plus complexes, appelées structures à cascade quantique. Dans le chapitre suivant, nous allons procéder à une étude d'optimisation des lasers à cascade quantique à base d'antimoniures.

## Références

- 
- [1] Tim Ashley, Louise Buckle, Gilbert W. Smith, Ben N. Murdin, Paul H. Jefferson, Louis F.J.Piper, Tim D. Veal, Chris F. McConville, *Infrared Technology & Applications XXXII*, edited by Bjørn F. Andresen Gabor F. Fulop, Paul R. Norton, Proc. of SPIE Vol. **6206**, pp. 62060L1-8, (2006).
  - [2] Junqiao Wu, *Journal of Applied Physics*, **106**, 011101, (2009).
  - [3] Vurgaftman, Meyer and Ram-Mohan, *J. Appl. Phys.*, **89**, 5815, (2001).
  - [4] Thomas B. Bahder, *Phys. Rev.*, **B41** (17), 11992-12001 (1990)
  - [5] N. Boukli-Hacene, K. Zitouni, and A. Kadri, *AIP Conf. Proc.*, **1416**, 150, (2011)
  - [6] I. Suemune, *IEEE J. Quantum Electron.*, Vol. **27**, pp. 1149-1159, (1991).
  - [7] R.L. Aggarwal, J.J. Zayhowski, B. Lax, *Appl. Phys. Letters* **62**(23), 2899-2901 (1993).

## **Chapitre IV :**

# **Étude d'optimisation des lasers de type II ou Lasers à Cascade Quantique à transition inter-sous-bandes à base de $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$**

IV.1. Introduction.....	74
IV.2. Étude des lasers à Cascade Quantique.....	75
IV.2.1. État de l'art sur les Lasers à Cascade Quantique .....	76
IV.2.2. Principe de fonctionnement des lasers intra-bandes.....	76
IV.2.3. Applications des LCQ dans le domaine du THz .....	78
IV.3. Transition inter-sous-bandes dans un Puits Quantique .....	81
IV.3.1. Les états électroniques.....	81
IV.3.2. Règles de sélection .....	82
IV.3.3. Taux de transitions (spontanée et stimulée) .....	83
IV.4. Émission inter-sous-bandes .....	85
IV.4.1. Conditions pour obtenir une inversion de population .....	85
IV.5. Optimisation de la structure laser à cascade quantique.....	88
IV.5.1. Structure du LCQ.....	88
IV.5.3. Gain intra-bande .....	91
IV.5.4. Densité de courant de seuil.....	95
IV.5.4. Gain du laser .....	96
IV.6. Conclusion .....	97

## IV.1. Introduction :

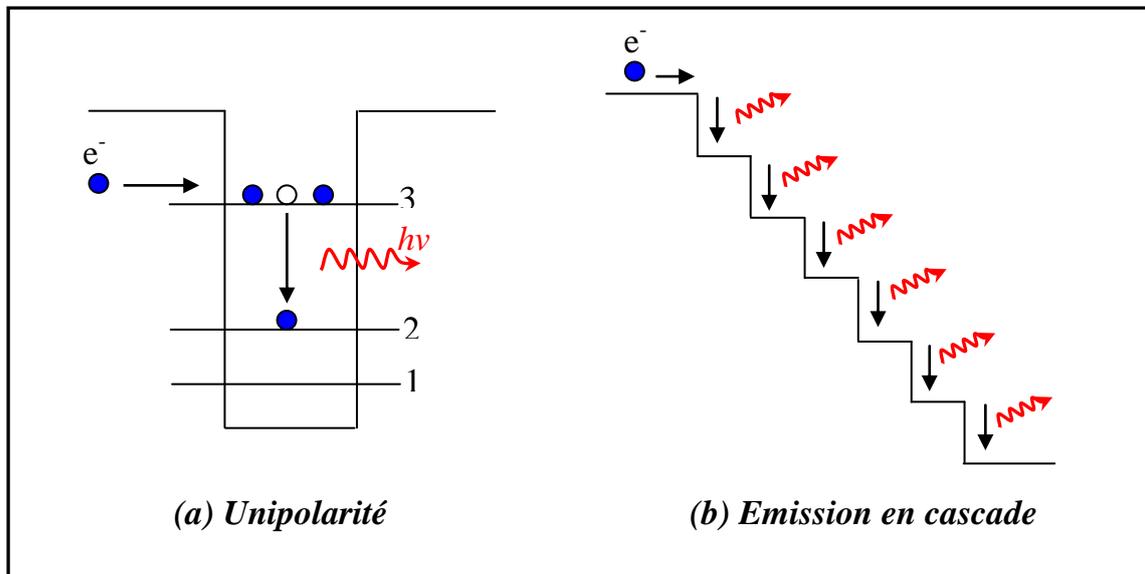
Dans ce chapitre, nous procédons à une étude d'optimisation de la structure laser à cascade quantique à base du système  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$  (quaternaire/quinaire). Dans un premier temps, nous présentons le principe fondamental de fonctionnement des lasers à cascade quantique (LCQ) à transition intra-bandes ou inter-sous-bandes. Grâce à ce type de transition, les lasers à cascade quantique permettent de couvrir la gamme du moyen infrarouge et ils permettent également d'émettre dans le domaine du THz. Ces deux gammes spectrales sont très intéressantes pour de nombreuses applications. Dans le deuxième chapitre, nous avons présenté les différentes applications des lasers dans le domaine du moyen infrarouge. Dans ce chapitre, nous allons passer en revue les différentes applications des LCQ dans le domaine du THz. Ensuite, nous décrirons les principaux paramètres à optimiser pour obtenir l'émission laser inter-sous-bandes.

Notre objectif étant d'améliorer les performances du laser à cascade quantique: améliorer la longueur d'onde d'émission, avoir un faible courant de seuil, un gain élevé et une forte puissance. Ceci en choisissant de manière judicieuse:

- Les bonnes compositions d'alliages;
- Les bonnes épaisseurs des puits et des barrières
- Le champ appliqué.
- La structure optimale du LCQ (zone active, zone d'injection);

## IV.2. Étude des Lasers à Cascade Quantique

Contrairement aux diodes lasers à puits quantiques étudié en chapitre II et en chapitre III, les lasers à cascade quantique (LCQ) sont des dispositifs *unipolaires* qui reposent sur des transitions "intra-bandes": des transitions optiques entre les différents états quantiques de la bande de conduction du semi-conducteur. (Figure IV.1).



**Figure IV.1 [1] :** Représentation schématique de deux principes de bases qui caractérisent un laser à cascade quantique. (a) Transitions optiques entre différentes sous-bandes de la bande de conduction. (b) Plusieurs zones émissives sont juxtaposées et polarisées, un électron est utilisé pour émettre en cascade plusieurs photons.

La longueur d'onde d'émission ne dépend pas de l'énergie de la bande interdite comme c'est le cas des lasers inter-bandes, mais elle est déterminée par le confinement quantique : en jouant sur l'épaisseur de chacune des couches formant l'hétérostructure, on modifie l'écart énergétique entre les sous bandes et par conséquent, on modifie la longueur d'onde d'émission du laser. Cette propriété remarquable permet aux lasers à cascade quantique d'émettre dans un large domaine spectral du MIR, FIR et du THz.

Avant de présenter le principe de fonctionnement de ces lasers, on se propose d'exposer une brève histoire des lasers à cascade quantique.

### IV.2.1. État de l'art des lasers à cascade quantique

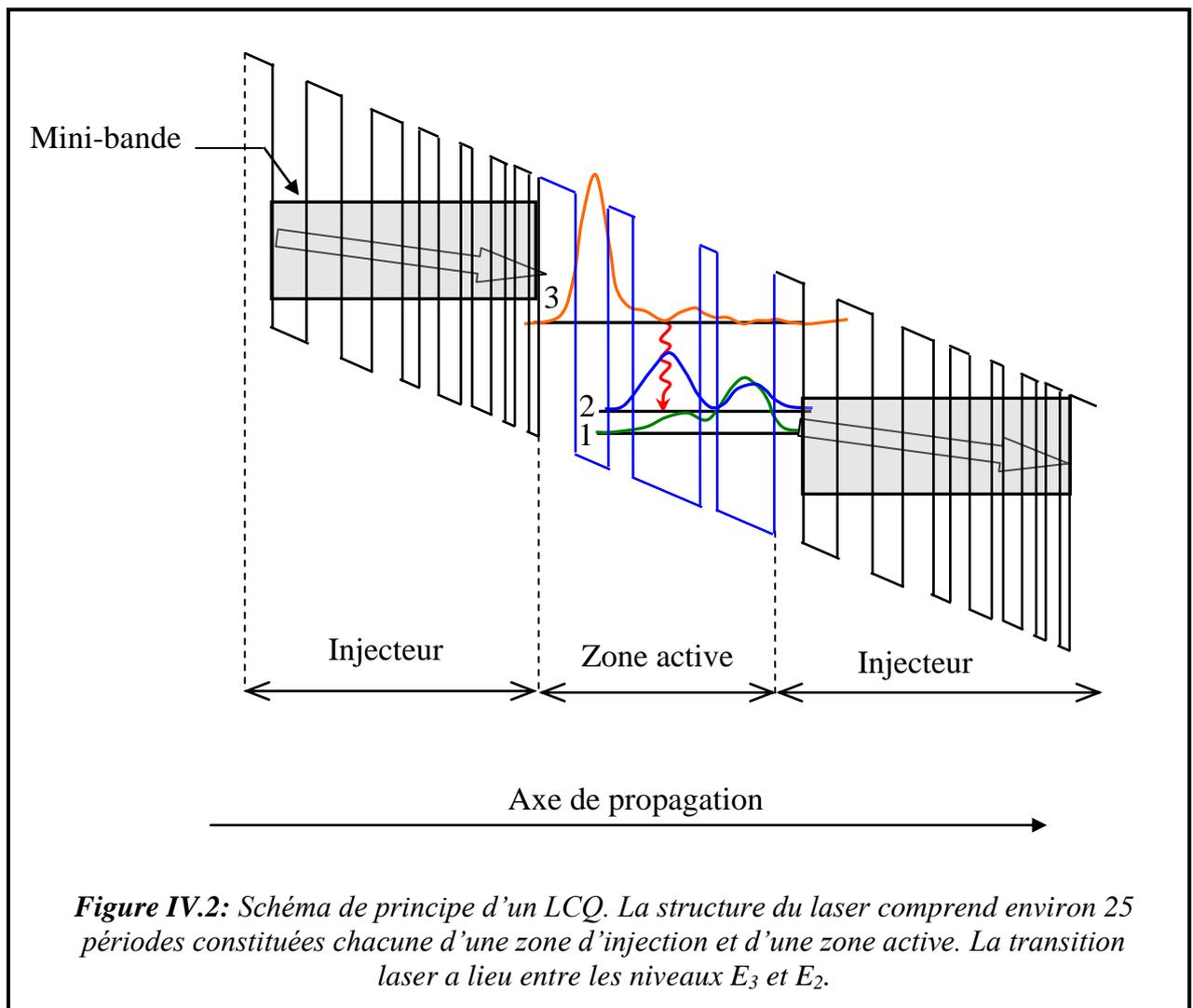
La notion des lasers à cascade quantique qui reposent sur les transitions intra-bandes du semi-conducteur provient d'une étude établie en 1971 par deux chercheurs russes R.Kasarinov et R.Suris [2], dans laquelle ils proposent un moyen d'amplifier de la lumière dans un super-réseau polarisé et d'obtenir ainsi une émission infrarouge entre sous-bandes. Cependant, l'amplification de la lumière est une condition nécessaire mais insuffisante pour avoir un effet laser, car il faut atteindre l'inversion de population ; il faut que la durée de vie des électrons soit plus longue dans l'état excité que dans l'état final. Dans ce contexte, une équipe de Bell laboratoires a réussi à montrer pour la 1<sup>ière</sup> fois en 1994 l'existence d'une inversion de population entre sous-bandes sous pompage électrique [3]. Ce principe a donné naissance à un nouveau laser appelé "*laser à cascade quantique*".

Le premier laser réalisé par Faist et al. au Bell-Laboratoires a donné une émission à  $4.2 \mu\text{m}$  en utilisant des hétérostructures à base de  $Al_{0.48}In_{0.52}As/Ga_{0.47}In_{0.53}As-InP$  [3]. Dès lors, ces sources lasers ont connu un développement considérable, ils couvrent aujourd'hui la gamme spectrale  $2.6 \mu\text{m}$  [4]  $\leq \lambda \leq 24 \mu\text{m}$  [5], et même dans le domaine de fréquences Téra-hertz [6]

### IV.2.2. Principe de fonctionnement des lasers intra-bandes

Le principe de fonctionnement du laser à cascade quantique est illustré sur la figure IV.2 qui représente le diagramme énergétique de la bande de conduction d'une structure à cascade quantique sous polarisation.

La structure du laser à cascade quantique est périodique où chaque période est constituée d'une zone active et d'une zone d'injection.



La **zone active** est la zone d'émission du laser, elle est conçue pour présenter au minimum trois niveaux d'énergie en bande de conduction afin d'assurer le confinement des électrons et l'émission stimulée. Il s'agit d'un multi-puits quantiques constitué de puits quantiques couplés.

La transition radiative se produit entre le niveau excité  $E_3$  et le niveau  $E_2$ . La transition  $2 \rightarrow 1$  étant non radiative, permet de vider la sous-bande 2 par relaxation inélastique, assistée par les phonons optiques, dans la sous-bande 1.

Le fonctionnement du laser nécessite la réalisation d'une inversion de population, celle-ci est obtenue en injectant de manière sélective les électrons dans le niveau excité

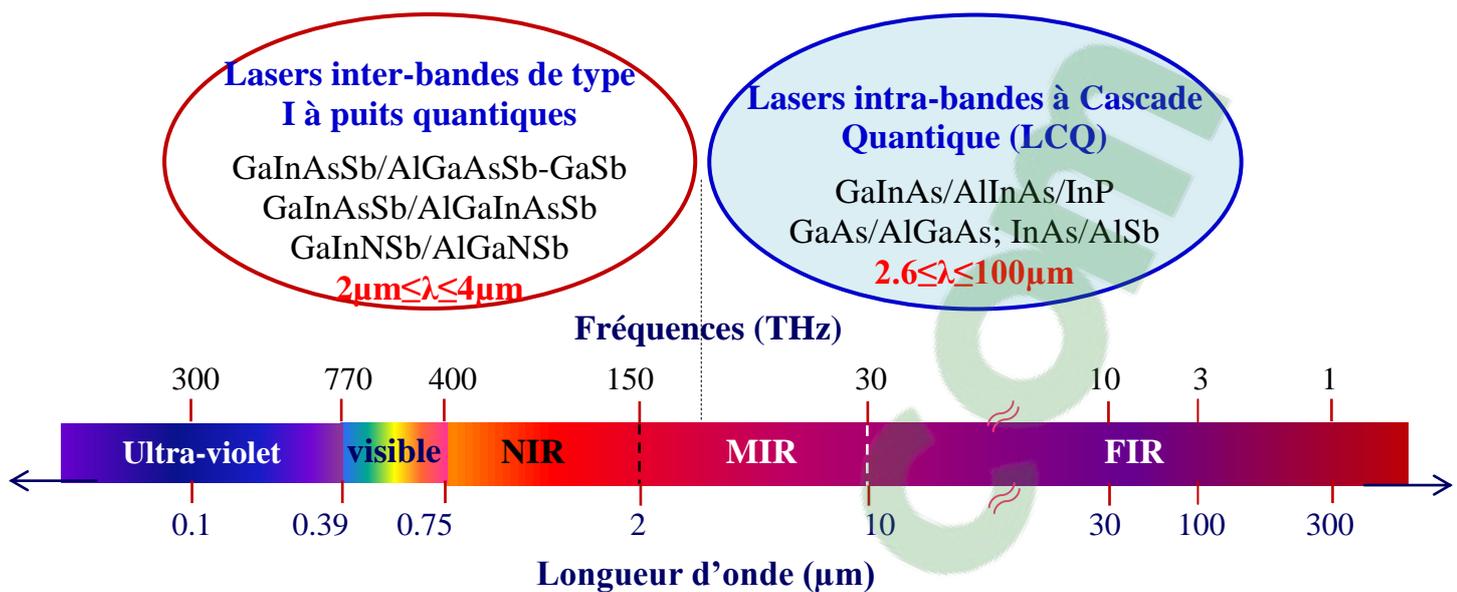
E<sub>3</sub>. Ceci se fait par ce qu'on appelle la **zone d'injection**. Il s'agit d'un super-réseau formé par une succession de couches de deux semi-conducteurs différents alternés périodiquement.

Le super-réseau permet d'une part l'injection et le transport des électrons par le processus d'effet tunnel et d'autre part pour avoir une structure en cascade, il suffit de polariser la structure. Le champ électrique appliqué permet d'aligner le niveau E<sub>1</sub> de la zone active à la mini-bande du super-réseau de l'injecteur. L'électron est relaxé ainsi dans l'injecteur jusqu'au niveau E<sub>3</sub> de la prochaine zone active et le processus se répète selon le nombre de périodes pour émettre à la fin du processus n photons tel que n est le nombre de périodes.

Chaque période produit un seul photon. Donc, pour augmenter le gain optique du laser, il suffit de mettre en série plusieurs périodes. Le nombre de période est déterminé de telle manière à optimiser les diverses performances : la tension et le courant de fonctionnement, la puissance optique et la puissance efficace [7], il varie entre 25 à 100 périodes dans certains LCQ.

### IV.2.3. Applications des LCQ dans le domaine du THz

La principale caractéristique des lasers à cascade quantique est leur fréquence d'émission. Actuellement les LCQ permettent d'émettre jusqu'au domaine du Téra-Hertz qui est compris entre  $\nu=1\text{THz}$  et  $\nu=10\text{THz}$ . Ce domaine de fréquences correspond au domaine de longueurs d'onde de l'infrarouge lointain de la gamme  $30\leq\lambda\leq 300\mu\text{m}$ . Sur la figure IV.3, nous représentons le spectre électromagnétique exprimé en longueur d'onde et en fréquences avec une comparaison entre le domaine d'émission des lasers inter-bandes de type I à puits quantique avec celui des lasers intra-bande à cascade quantique.



NIR : Proche Infrarouge :  $0.78\mu m \leq \lambda \leq 2\mu m$

MIR : Moyen Infrarouge :  $2\mu m \leq \lambda \leq 10\mu m$

FIR : Infrarouge lointain :  $10\mu m \leq \lambda \leq 300\mu m$

**Figure IV.3 :** Spectre électromagnétique exprimé en longueur d'onde et en fréquences avec une comparaison entre le domaine d'émission des lasers inter-bandes de type I à puits quantique avec celui des lasers intra-bande à cascade quantique.

Les lasers à cascade quantique constituent une alternative sérieuse aux lasers inter-bandes à puits quantiques. Ces lasers permettent de fonctionner dans les grandes longueurs d'onde avec de grandes puissances, ce qui permet leur utilisation dans plusieurs domaines d'applications :

➤ Spectroscopie hyperfine : le domaine du Téra-Hertz est très intéressant pour faire des mesures spectroscopiques très haute résolution. En effet plusieurs particules chimiques et gazeuses ont une forte absorption de rotation et de vibration dans ce domaine. Il est très intéressant de caractériser ces molécules et de déterminer leur concentration dans le milieu. La spectroscopie est utilisée dans plusieurs domaines : pour le contrôle de la pollution atmosphérique, l'analyse chimique de surface en microélectronique, l'étude de la composition de l'atmosphère des planètes, l'étude de l'appauvrissement de la couche d'ozone,...

➤ Imagerie THz :

- Dans le domaine biomédical, il existe plusieurs techniques d'imagerie permettant d'imager des structures cachées dans le corps humain tel que les ultrasons, les rayons X... La spectroscopie Téra-Hertz à l'aide des LCQ permet de visualiser la structure biologique sous la peau de façon non destructive, non invasive et sans contact avec les tissus. Le rayonnement pénètre profondément dans un tissu biologique et ressort en nombre suffisant pour être analysé par une caméra ou un détecteur infrarouge. L'imagerie Téra-Hertz est très adaptée pour : déterminer la présence des tumeurs cancéreuses, étude de l'ADN, diagnostiquer des ulcères, des maladies rénales, détecter instantanément et sans dommage pour la peau certaines molécules dans le sang. Un laser à cascade quantique a été utilisé pour détecter le glucose et le fructose [8].

- En sécurité, l'imagerie THz est très intéressante du fait que certains milieux sont transparents dans cette gamme, tel que les vêtements, le bois, le plastique, papiers, la peau... Le rayonnement THz permet de pénétrer ces milieux sans effets secondaires sur les systèmes vivants à sonder, ce qui permet d'utiliser cette technique pour détecter des produits dangereux tels que la drogue, les explosifs ou les armes qui peuvent être cachés. On montre sur la figure IV.4 détection par imagerie THz d'une arme blanche cachée dans un journal [9].



**Figure IV.4 [9] :** Imagerie THz révèle le couteau caché sous un journal.

### IV.3. Transition inter-sous-bandes dans un Puits Quantique :

#### IV.3.1. Les états électroniques

Un laser à cascade quantique est basé sur les transitions optiques entre les différents états quantiques de la bande de conduction d'une structure très complexe constituée de puits quantiques couplés.

Les états propres de l'électron dans la bande de conduction sont déterminés à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger :

$$\left( \frac{P^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (IV.1)$$

Où  $p$ ,  $m_0$  sont respectivement l'impulsion de l'électron et la masse de l'électron libre.  $\vec{r}$  et  $V(\vec{r})$  sont le vecteur position de l'électron et le potentiel cristallin ;  $E$  est l'énergie de l'électron et  $\Psi(\vec{r})$  est la fonction d'onde de l'électron.

En appliquant le formalisme de la fonction enveloppe, la fonction d'onde de l'électron est définie comme suit :

$$\Psi(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \Psi_n(\vec{r}) \quad (IV.2)$$

Avec  $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$  est la fonction de Bloch et  $\Psi_n(\vec{r})$  est la fonction enveloppe qui est simplifiée par :

$$\Psi_n(\vec{r}) = \frac{1}{S} e^{i\vec{k}_{//} \cdot \vec{r}_{//}} \varphi_n(z) \quad (IV.3)$$

Où  $\vec{k}_{//}$  et  $\vec{r}_{//}$  sont respectivement le vecteur d'onde et le vecteur position dans le plan  $(x,y)$ .  $S$  est la surface du domaine étudié.

Pour résoudre l'équation de Schrödinger (éq. IV.1), on fait appel à l'approximation de la masse effective. Cette approche permet de décrire le mouvement d'un électron de

masse  $m_0$  dans un matériau massif par le mouvement d'un quasi électron libre de masse  $m^*$ , tel que :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk_x dk_y} \quad (IV.4)$$

Où  $E$  est l'énergie du niveau électronique et  $k$  le vecteur d'onde de l'électron.

On considère que la masse effective des électrons est constante, indépendante de  $E$ , l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\left( \frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + U_H(z) \right) \varphi_{ci}(z) = E_{ci} \varphi_{ci}(z) \quad (IV.5)$$

Où  $\varphi_{ci}$  est la partie dépendant de  $z$  de la fonction enveloppe à l'énergie  $E_{ci}$  dans la bande de conduction.  $U_H(z)$  est l'énergie potentielle suivant l'axe  $z$  (l'axe de propagation)

Dans le cas d'un potentiel infini, les solutions de l'équation IV.5 sont:

$$\varphi_{cn}(z) = \sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin\left(n \frac{\pi z}{L_z}\right) \quad (IV.6)$$

$$E_{cn}(z) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{n\pi}{L_z} \right)^2 \quad (IV.7)$$

Où  $n$  est un entier,  $L_z$  est la largeur du puits.

### IV.3.2. Règles de sélection

La probabilité pour qu'un électron qui passe d'un niveau initial  $E_i$  à un niveau final  $E_f$  est donnée par la règle d'or de *Fermi*:

$$W_{i \rightarrow f}(\hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \Psi_f | H | \Psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega) \quad (IV.8)$$

Où H est l'Hamiltonien d'interaction.  $E_i$  et  $E_j$  sont les énergies des niveaux i et j respectivement,  $-\hbar\omega$  et  $+\hbar\omega$  correspondent à l'absorption du photon incident et à l'émission stimulée du photon respectivement.

### IV.3.3. Taux de transition inter-sous-bandes:

➤ Taux d'émission spontanée

L'expression du taux de l'émission spontanée entre un état initial i et un état final j, s'exprime de la manière suivante [10]:

$$\frac{1}{\tau_{i \rightarrow f}^{SP}} = W_{i \rightarrow f}^{SP} = \frac{q_0^2 n z_{i \rightarrow f}^2 E_{f \rightarrow i}^3}{3\pi c^3 \varepsilon_0 \hbar^4} = \frac{q_0^2}{6\pi m_0 c^3 \varepsilon_0 \hbar^2} n f_{i \rightarrow f} E_{f \rightarrow i}^2 (s^{-1}) \quad (IV.9)$$

Où  $q_0$ : est la charge de l'électron, n : est l'indice de réfraction du milieu, c la vitesse de la lumière dans le vide et  $\varepsilon_0$  est la perméabilité du vide.  $Z_{i \rightarrow f}$  sont les éléments de la matrice  $\langle \varphi_i | \varphi_f \rangle$  et  $E_{f \rightarrow i}$  est l'énergie de transition de l'état f vers l'état i.

$f_{i \rightarrow j}$  est la **force d'oscillateur** qui est définie par [11] :

$$f_{i \rightarrow f} = \frac{2m_0(E_i - E_f)|Z_{i \rightarrow f}|^2}{\hbar^2} \quad (IV.10)$$

Dans le cas d'un puits de potentiel infini, la force d'oscillateur se simplifie par [12]:

$$f_{i \rightarrow j} = \frac{2^6}{\pi^2} \frac{(if)^2}{(f^2 - i^2)^3} P(i-f) \frac{m_0}{m^*} \quad (IV.11)$$

$P(n)$  est une fonction qui vaut 0 quand n est pair et 1 si n est impair.

➤ Taux d'émission stimulée : le taux d'émission stimulée est donné par cette équation [13]:

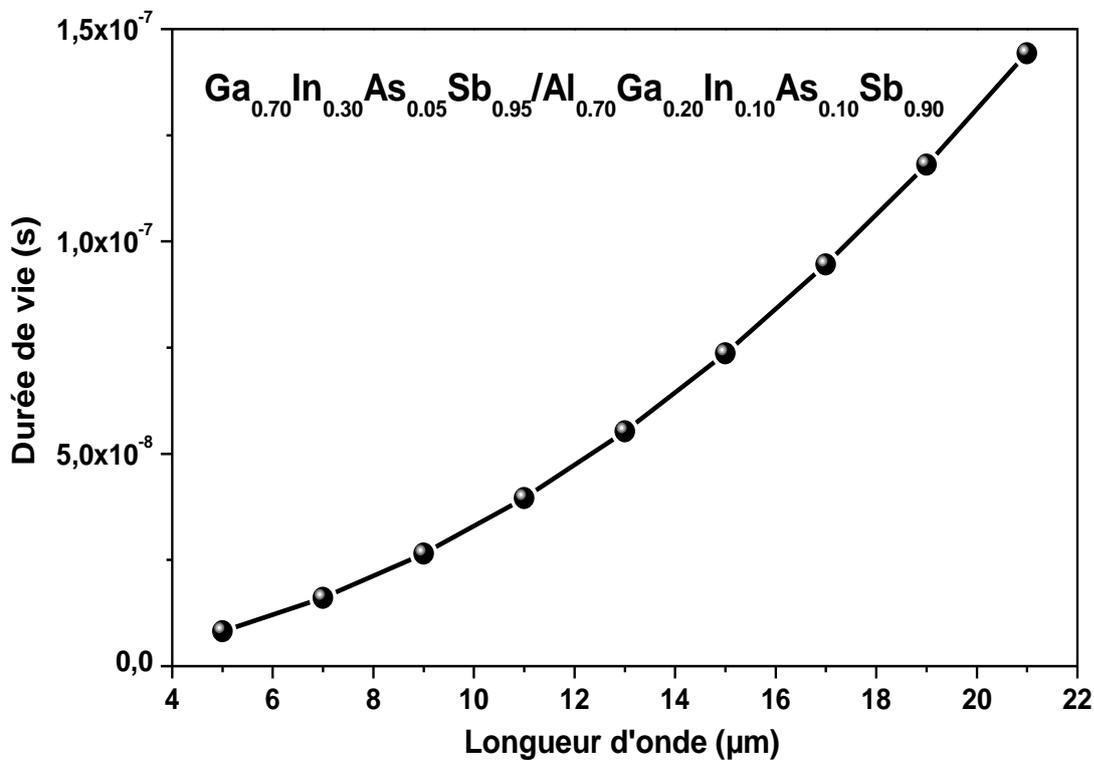
$$\frac{1}{\tau_{i \rightarrow f}^{St}} W_{i \rightarrow f}^{St} = w_{i \rightarrow f}^{Sp} \frac{3c^2 I(\nu)}{8\pi \hbar \nu^3 n^2} L(\nu) \quad (IV.12)$$

Où:  $I(\nu)$  est l'intensité lumineuse de l'onde qui se propage dans l'hétéro-structure.

$$L(\nu) = \frac{\frac{2}{\pi} \gamma_{if}}{(\nu - \nu_0)^2 + \gamma_{if}^2} \quad (IV.13)$$

Où  $2\gamma_{if}$  correspond à la largeur à mi-hauteur de la lorentzienne en fréquence.

Sur la figure IV.5 nous montrons la variation de la durée de vie spontanée en fonction de la longueur d'onde d'émission. Comme montré sur la figure, la durée de vie spontanée dépend nettement de la longueur d'onde. L'équation IV.9 indique que le temps spontané est inversement proportionnel au carré de l'énergie de transition  $E_{fi}$  et par conséquent, il est proportionnel au carré de la longueur d'onde d'émission. Ceci signifie que la durée de vie spontanée augmente avec l'augmentation de la longueur d'onde.



*Figure IV.5 : Durée de vie spontanée en fonction de la longueur d'onde*

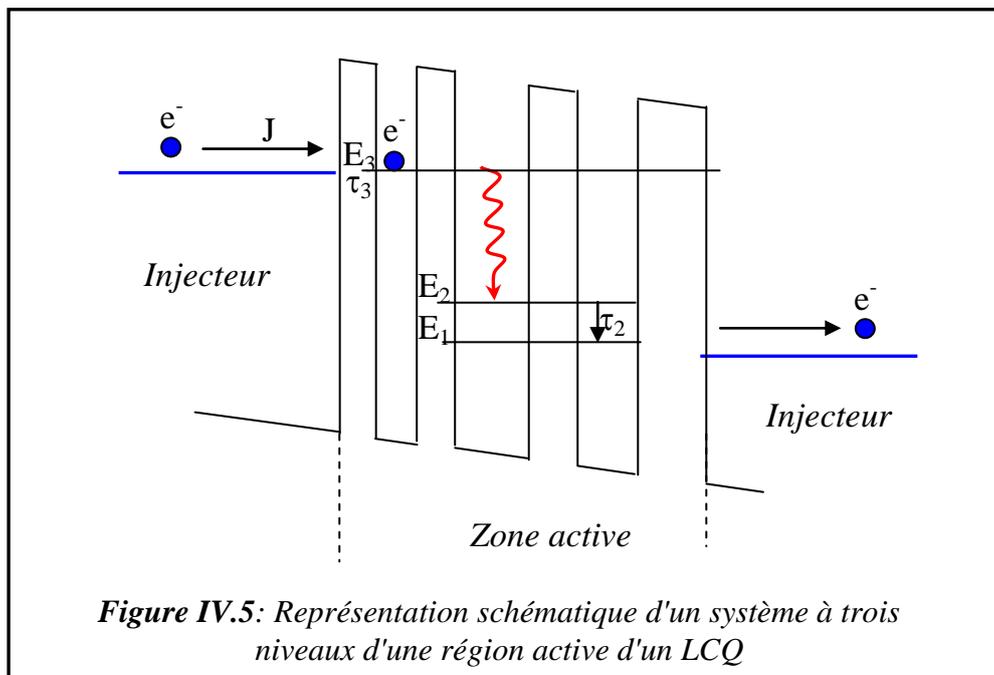
Le calcul représenté sur la figure IV.5 montre la durée de vie spontanée en fonction de  $\lambda$  entre  $5\mu\text{m}$  et  $21\mu\text{m}$ . La durée de vie augmente avec l'augmentation de la longueur d'onde. Pour  $\lambda=5\mu\text{m}$ , la durée de vie spontanée est estimée à  $\approx 8.18 \cdot 10^{-9}$  alors que pour  $\lambda=21\mu\text{m}$ , la durée de vie spontanée est estimée à  $\approx 7.36 \cdot 10^{-8}$ .

#### IV.4. Émission inter-sous-bande :

Pour que l'émission laser soit réalisée, une inversion de population doit être effectuée entre le niveau  $E_3$  et  $E_2$ . Dans le paragraphe suivant, nous allons formuler les équations bilan d'un système à trois niveaux de la zone active d'un LCQ.

##### IV.4.1. Conditions pour obtenir une inversion de population:

La figure IV.5 montre un système à trois niveaux schématisant la région active d'un LCQ.



Le coefficient d'injection est défini comme étant le rapport du courant injecté ( $J_3$ ) et le courant total ( $J$ ), tel que [14]:

$$\eta_i = \frac{J_3}{J} \quad (\text{IV.14})$$

La densité d'électrons dans le niveau  $E_3$  est donnée par cette équation:

$$n_3 = \frac{\eta_i J}{e} \tau_3 \quad (IV.15)$$

Où  $\tau_3$  est la durée de vie de l'électron dans le niveau  $E_3$ .

Si on considère que le niveau  $E_2$  est totalement remplie par les électrons transités du niveau  $E_3$ , la densité d'électrons dans le niveau  $E_2$  s'exprime de la manière suivante:

$$n_2 = n_3 \frac{\tau_2}{\tau_{32}} = \frac{\tau_2 \eta_i J}{e} \quad (IV.16)$$

Où  $\tau_{32}$  est le taux de transition du niveau  $E_3$  vers  $E_2$ .

$\tau_2$  est la durée de vie de l'électron dans le niveau  $E_2$ .

À partir des équations IV.15 et IV.16, l'inversion de population s'écrit:

$$n_3 - n_2 = \frac{\eta_i J}{e} \tau_3 \left(1 - \frac{\tau_2}{\tau_{32}}\right) \quad (IV.17)$$

La condition d'inversion de population impose:  $\tau_{32} > \tau_2$ . La durée de vie  $\tau_3$  dépend d'une part de la durée de vie de transition  $E_3-E_2$  et d'autre part de la durée de vie de transition du niveau  $E_3$  vers  $E_1$  telle que [15]:

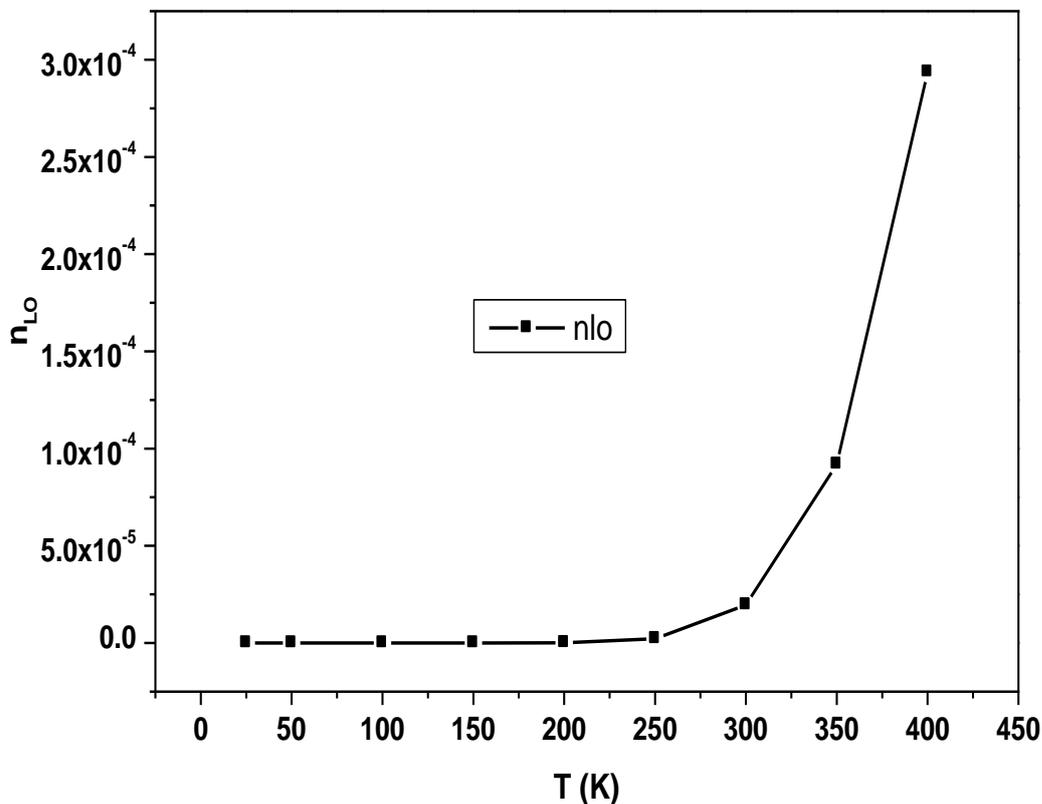
$$\tau_3 = \frac{1}{\frac{1}{\tau_{32}} + \frac{1}{\tau_{31}}} \quad (IV.18)$$

Pour avoir un faible  $\tau_2$  et un grand  $\tau_{32}$ , l'écart énergétique:  $E_{21}=E_2-E_1$  doit être très faible par rapport à l'énergie de transition  $E_3-E_2$ . Pour les lasers à cascade quantique émettant dans le moyen infrarouge, l'écart énergétique  $E_{21}$  est ajusté de telle manière qu'il soit égal à l'énergie du LO-phonon (phonon optique longitudinal) car ce dernier est de l'ordre de la picoseconde [16].

Le temps de relaxation d'un électron par émission de LO-phonon est calculé à partir de la règle d'or de Fermi, tel que:

$$\frac{1}{\tau_{if}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \Psi_i | V(r) | \Psi_f \rangle \right|^2 \delta(E_F + \hbar\omega_{LO} - E_i) \quad (IV.18)$$

Les transitions non-radiatives assistées par les phonons optiques dans les lasers à cascade quantique présentent deux effets opposés. Le premier consiste à obtenir l'inversion de population, du fait que ces transitions permettent de vider la sous-bande 2 par des transitions très rapides. Le deuxième consiste aux interactions électron-phonon qui sont néfastes pour le fonctionnement du laser. Ces interactions sont de plus en plus importantes quand la température augmente où l'émission des phonons est importante. D'où le fonctionnement des LCQ est limité à basse température. Afin d'améliorer la température de fonctionnement et les performances des LCQ, de nouvelles zones actives ont été proposées et réalisées [17,18].



**Figure IV.6** : Variation du nombre de phonons en fonction de la température

Le nombre de phonons dépend de la température via l'expression de Bose-Einstein :

$$n_{LO} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{LO} / kT) - 1} \quad (IV.19)$$

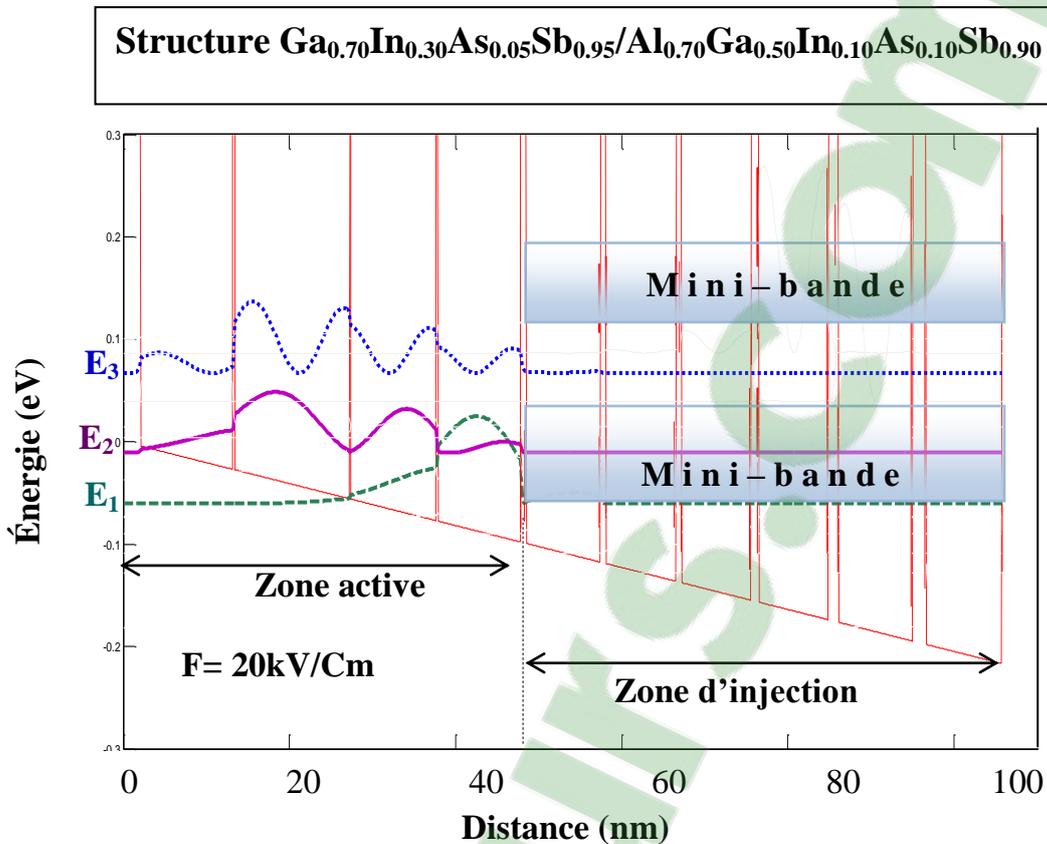
Sur la figure IV.6, nous représentons la variation du nombre de phonons en fonction de la température. La figure montre que le nombre de phonons est constant puis il augmente rapidement au-delà de  $T = 250K$ .

## IV.5. Optimisation de la structure laser à cascade quantique

### IV.5.1. Structure du LCQ

La structure du LCQ à base du système  $Ga_{0.70}In_{0.30}As_{0.05}Sb_{0.95}/Al_{0.70}Ga_{0.50}In_{0.10}As_{0.10}Sb_{0.90}$  est constituée de plusieurs périodes, chaque période comprend une zone active et une zone d'injection. Sur la figure IV. 6, nous représentons le profil de la bande de conduction d'une seule période de puits quantiques  $Ga_{0.70}In_{0.30}As_{0.05}Sb_{0.95}$  et de barrières à base de  $Al_{0.70}Ga_{0.50}In_{0.10}As_{0.10}Sb_{0.90}$ . Le band offset de cette hétérostructure est déterminé par la loi 2/3-1/3 d'Anderson et il est estimé à 650meV. Un champ électrique externe de l'ordre de 20kV/cm est appliqué à la structure afin d'avoir une structure en cascade. La bande de conduction est dénivelée, les états électroniques et les fonctions d'onde associées sont modifiés tels que d'une part la mini-bande de l'injecteur soit en résonance avec l'état  $E_3$  de la zone active adjacente pour l'injection des électrons dans le niveau  $E_3$ . L'émission laser s'effectue entre  $E_3$  et  $E_2$  à condition de réaliser l'inversion de population. Celle-ci est obtenue en fixant l'écart  $E_2-E_1$  en résonance avec l'énergie du phonon optique longitudinal. Dans ce cas, l'énergie du LO-phonon est estimée à 28.04 meV. Donc, l'électron se relaxe du niveau  $E_2$  vers  $E_1$  par une transition très rapide non radiative assistée par les phonons optiques. D'autre part, il faut que l'état  $E_1$  de la zone active soit localisé exactement en résonance avec la mini-bande de l'injecteur adjacent. Ceci

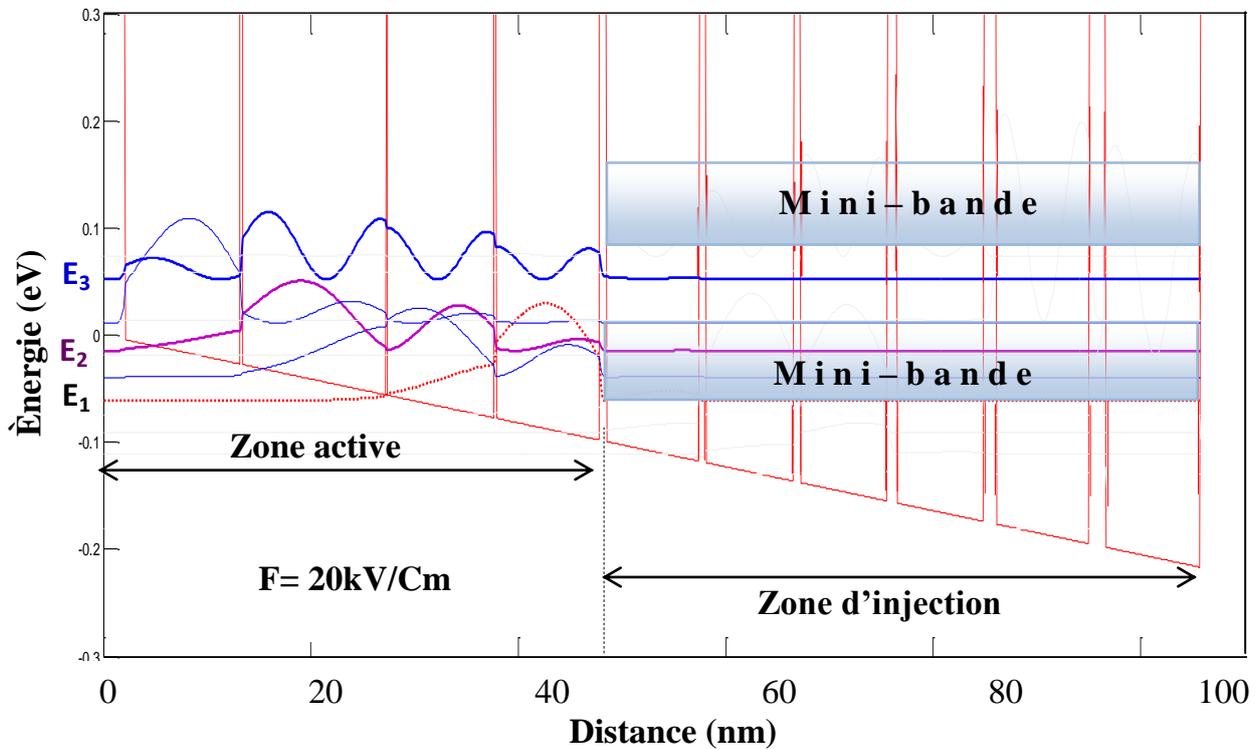
permet à l'électron de se relaxer dans l'injecteur vers la zone active suivante et le processus se répète selon le nombre de périodes.



**Figure IV.6 :** Profil de la bande de conduction du laser  $Ga_{0.70}In_{0.30}As_{0.05}Sb_{0.95}/Al_{0.70}Ga_{0.50}In_{0.10}As_{0.10}Sb_{0.90}$ . L'épaisseur en nanomètre des couches est, à partir de la barrière d'injection: **21/139/1.5/111/1.5/102/3/99/6/91/6/85/6/84/9/84/12/90/15/91**. Les barrières sont en gras et les couches dopées sont soulignées.

La longueur d'onde d'émission est déterminée par les épaisseurs des puits et des barrières de la zone active. Pour cette structure, on retrouve une énergie de séparation  $E_{32} = E_3 - E_2 = 78.06$  meV, ce qui correspond à une longueur d'onde  $\lambda = 15.88 \mu m$  d'où une fréquence  $\nu = 18.9$  THz. Cependant, ces résultats sont obtenus sans tenir compte des effets de contraintes et de non-parabolicité. Or, ces effets influent fortement sur : la masse effective de conduction, les énergies de confinements, les fonctions d'ondes, la longueur d'onde d'émission, la force d'oscillateur, les durées de vie, temps de transit et le gain du laser. Cette étude sera détaillée au chapitre V de ce manuscrit et dans la partie suivante, nous allons montrer les effets de contrainte et de non-parabolicité sur la longueur d'onde d'émission, densité de courant et sur le gain optique du laser.

**Structure  $Ga_{0.70}In_{0.30}As_{0.05}Sb_{0.95}/Al_{0.70}Ga_{0.50}In_{0.10}As_{0.10}Sb_{0.90}$  en tenant compte de la non-parabolicité**



**Figure IV.6 :** Profil de la bande de conduction du laser  $Ga_{0.70}In_{0.30}As_{0.05}Sb_{0.95}/Al_{0.70}Ga_{0.50}In_{0.10}As_{0.10}Sb_{0.90}$ . L'épaisseur en nanomètre des couches est, à partir de la barrière d'injection: 21/139/1.5/111/1.5/102/3/99/6/91/6/85/6/84/9/84/12/90/15/91. Les barrières sont en gras et les couches dopées sont soulignées.

Sur la figure IV. 7, nous représentons le profil de la bande de conduction d'une seule période du LCQ  $Ga_{0.70}In_{0.30}As_{0.05}Sb_{0.95}/Al_{0.70}Ga_{0.50}In_{0.10}As_{0.10}Sb_{0.90}$ , en tenant compte des effets de contrainte et de la non-parabolicité. Cette hétérostructure présente une contrainte bi-axiale de compression de l'ordre de :  $\Delta a/a = 1.31\%$ , qui provoque une diminution de l'ordre de 8.15% du band offset,  $\Delta E_C$  est estimé à 597meV. Par contre l'effet de la contrainte combiné avec l'effet de la non-parabolicité influe sur le gap, la masse effective des électrons et sur les énergie de confinement et donc l'écart énergétique  $E_{32}$  sera modifié et par conséquent la longueur d'onde sera modifiée. En

faisant l'étude de ces effets en gardant la même structure de la figure IV.6 i.e. les mêmes épaisseurs des puits et des barrière et en gardant le même champ appliqué ( $F=20kV/cm$ ), la structure montrée sur la figure IV.7 indique une diminution de l'ordre de 7 % de l'énergie  $E_{32}$  qui est estimée à 72.6 meV, ce qui correspond à une longueur d'onde  $\lambda = 17.1\mu m$  d'où une fréquence  $\nu = 17.6THz$ . Ces résultats indiquent que la non-parabolicité provoque un décalage vers les grandes longueurs d'onde ce qui se traduit par un décalage vers le rouge (redshift).

### IV.5.2. Gain intra-bande

Le gain spectral est exprimé en fonction des fonctions de distribution  $f_2(\varepsilon_2)$  et  $f_3(\varepsilon_3)$  des états 2 et 3 respectivement tel que [19] :

$$g(\Omega) = \frac{4e^2 |z_{23}|^2 m_3 \Omega}{\hbar^3 L_Z c n} \int_0^\infty d\varepsilon \gamma(\varepsilon) [f_3(\varepsilon_3) - f_2(\varepsilon_2)] \frac{1}{[\Omega - \Omega_\varepsilon]^2 + [\gamma(\varepsilon)]^2} \quad (IV.20)$$

$z_{23}$  : est l'élément de matrice dipolaire,  $n$  : est l'indice de réfraction,  $L_Z$  est l'épaisseur du puits,  $\Omega_\varepsilon$  est la fréquence de transition.

$$\hbar k = \sqrt{2m_2 \varepsilon} \quad (IV.21)$$

$$\hbar \Omega_\varepsilon = \hbar \Omega_0 + \varepsilon_2 - \varepsilon_1 \quad (IV.22)$$

$\varepsilon_3$  et  $\varepsilon_2$  sont les énergies correspondantes des niveaux supérieur et inférieur respectivement tel que :

$$\varepsilon_3 \equiv \varepsilon ; \quad \varepsilon_2 \equiv (\varepsilon m_3 / m_2) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_2} \quad (IV.23)$$

$\gamma(\varepsilon)$  est le taux de relaxation due aux processus de recombinaison non-radiatifs.

Clicours.COM

L'expression IV. 5 peut être simplifiée par [20] :

$$g(\Omega) = \frac{4e^2 |z_{23}|^2 n_3 \Omega}{\hbar L_z c n k} \times \int_0^\infty \frac{d\varepsilon \gamma(\varepsilon) e^{-\varepsilon/kT_e}}{[\Omega - \Omega_\varepsilon]^2 + [\gamma(\varepsilon)]^2} \left(1 - \frac{f_2}{f_3}\right) \quad (IV.24)$$

Tel que :

$$\frac{f_2}{f_3} = \frac{n_2}{n_3} \frac{m_3}{m_2} e^{(\varepsilon/kT_e)(1-m_3/m_2)} \quad (IV.25)$$

La puissance d'entrée est donnée par cette équation [20]

$$P_{\text{int}} \approx J \hbar \Omega \quad (IV.26)$$

$$P_{\text{int}} = n_D k (T_e - T) / \tau_\varepsilon \quad (IV.27)$$

$$k(T_e - T) = \frac{J \tau_\varepsilon \hbar \Omega}{n_D} \quad (IV.28)$$

La puissance d'entrée dépend de la densité des porteurs injectés  $n_D$ .

On considère que la densité de porteurs injectés est faible tel que  $n_D \leq 10^{11} \text{cm}^{-2}$ . La puissance  $P_{\text{int}}$  est dissipée via la sous-bande inférieure. Le processus de diffusion non-radiatif dominant est dû aux transitions non-radiatives assistées par les phonons optiques longitudinaux, tel que la durée de vie de transition est :  $\tau_{21}^{-1} = 10^{12} \text{s}^{-1}$

La fonction de distribution  $f_2(\varepsilon_2)$  est donnée par [20]:

$$f_2(\varepsilon_2) = f_{\text{max}} \cdot (1 + \mu)^{\tilde{\varepsilon}/\hbar\omega_{ph}} \approx f_{\text{max}} e^{\mu \tilde{\varepsilon}/\hbar\omega_{ph}} \quad (IV.29)$$

Avec :

$$\tilde{\varepsilon} \equiv \varepsilon_2 + \hbar\omega_{ph} - \hbar\Omega_0 ; f_{\text{max}} \equiv f(\hbar\Omega_0 - \hbar\omega_{ph}) \quad (IV.30)$$

$\hbar\omega$  est l'énergie du phonon,  $\mu \equiv 1/\gamma_0 \tau_{1out}$  tel que :

$$\tau_{1out} \approx 1 \text{ps} ; \quad \gamma_0 = \gamma(\varepsilon) \hbar\omega_{ph} \approx 10^{13} \text{s}^{-1} \quad (IV.31)$$

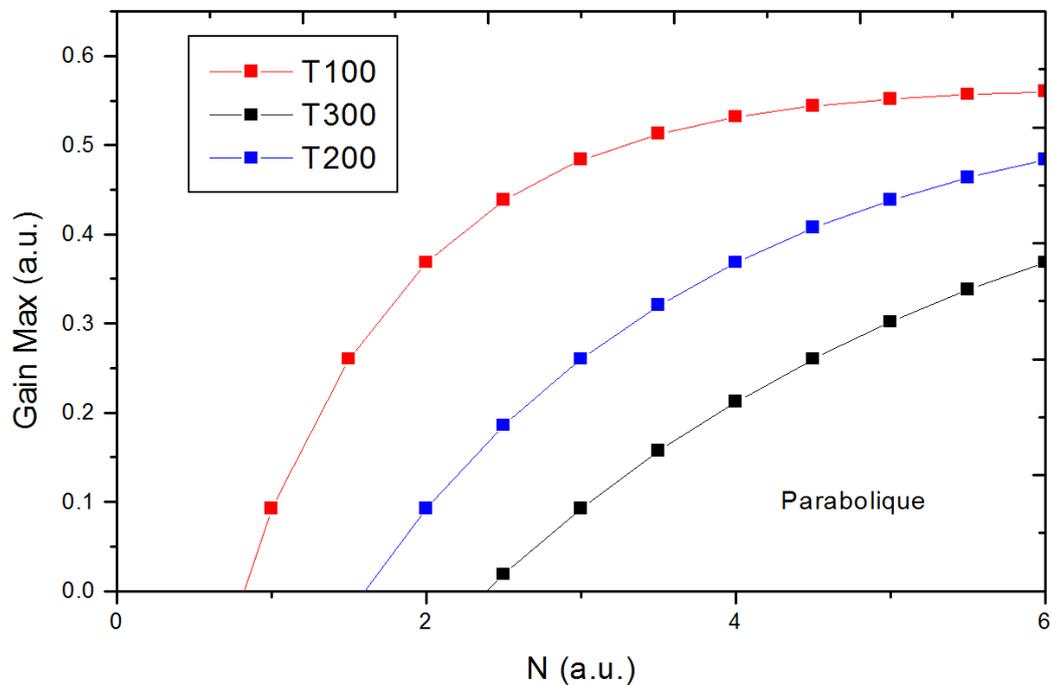
Le gain modal est donné par:

$$g_M \equiv \Gamma g(\Omega_L) \quad (IV.32)$$

Où  $\Omega_L$  est la fréquence du laser qui maximise le gain  $g(\Omega)$ .  $\Gamma$  est le facteur de confinement.

➤ Gain max parabolique :

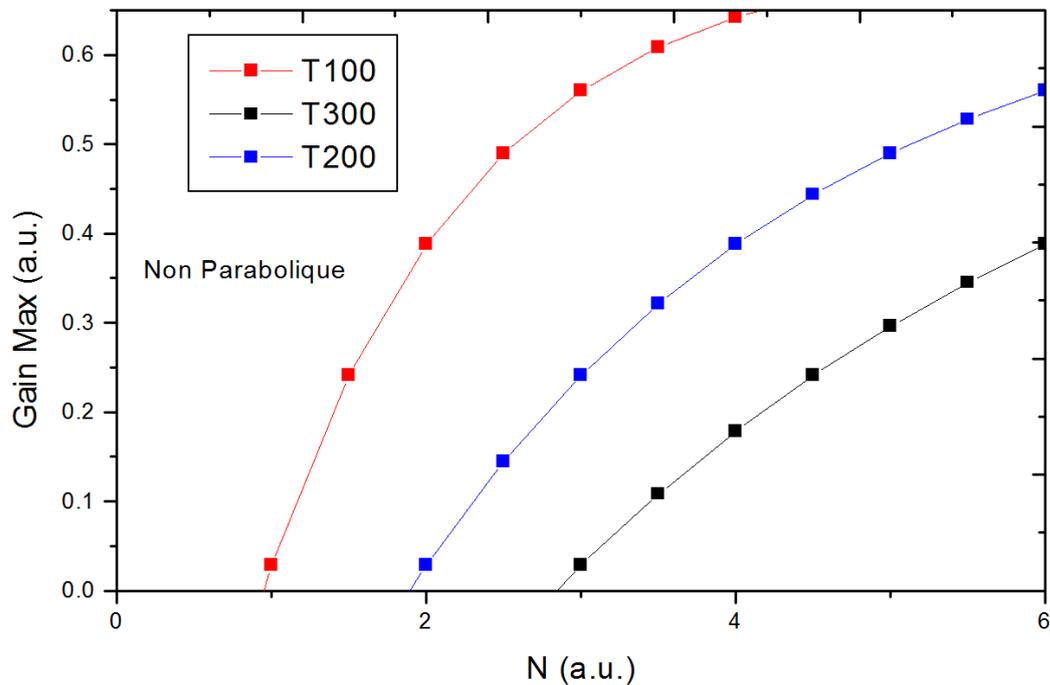
Sur la figure IV.8, nous représentons le calcul du gain max en fonction de la densité de porteurs et pour différentes températures.



**Figure IV.8 :** Variation du gain max parabolique en fonction de la densité de porteurs et pour différentes températures

La figure montre que la densité de seuil augmente quand la température augmente. Par contre, l'augmentation de la température provoque une diminution du gain max du laser. Ceci est dû au fait que quand la température augmente, la densité de seuil augmente, la densité de courant de seuil augmente et il s'ensuit une diminution du gain.

➤ Gain max non-parabolique :



**Figure IV.9 :** Variation du gain max non-parabolique en fonction de la densité de porteurs et pour différentes températures

En comparant le cas non-parabolique avec celui parabolique, la figure IV.9 montre la variation du gain max en fonction de la densité de porteurs pour différentes températures. La densité de seuil dans le cas parabolique est plus faible que dans le cas non-parabolique. La diminution de la densité de seuil non-parabolique est estimée à 7.06% pour  $T = 100K$ . Ceci est dû au fait que la non-parabolicité provoque une augmentation de la masse effective de conduction, augmentation des énergies de confinement et par conséquent augmentation de la densité de seuil du laser. Ce résultat estime une augmentation du courant de seuil laser et diminution du gain.

### IV.5.3. Densité de courant de seuil :

Le seuil en densité  $J_{th}$  du laser est la valeur que le courant doit prendre pour que le gain soit égal aux pertes optiques totales du guide d'onde :

$$g_M \equiv \alpha_{Loss} \quad (IV.33)$$

Où  $\alpha_{Loss} = \alpha_m + \alpha_{cav}$

$\alpha_{cav}$  : les pertes résultant de l'absorption des divers matériaux à l'intérieur du guide;

$\alpha_m$  : les pertes aux miroirs dues à l'extraction des photon par les facettes de la cavité tel que :

$$\alpha_m = \frac{1}{L} \ln\left(\frac{1}{R}\right) \quad (IV.34)$$

Où R est le pouvoir réflecteur des facettes.

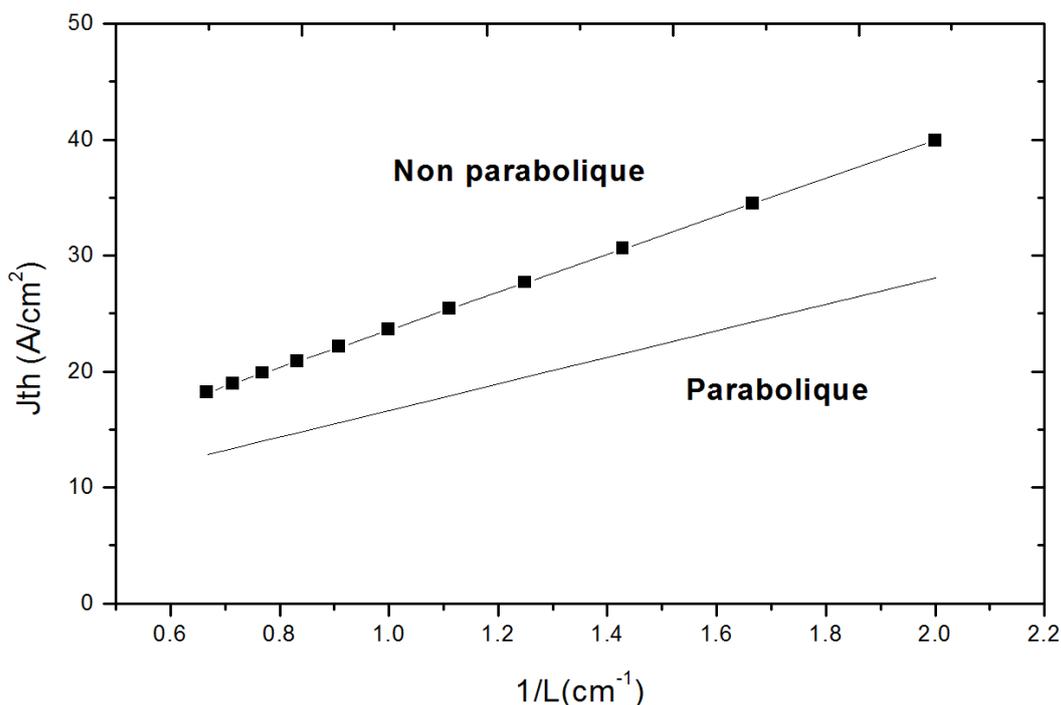
Donc, la densité de courant de seuil laser s'écrit:

$$J_{th} = \frac{\alpha_w}{g\Gamma} - \frac{\ln(R)}{g\Gamma} \frac{1}{L} \quad (IV.35)$$

Où L : est la largeur de la cavité.

Sur la figure IV.10, nous représentons la variation de la densité de courant de seuil en fonction de l'inverse de la largeur de la cavité. Comme indiqué sur la figure, la densité de courant de seuil laser est importante dans le cas non-parabolique que dans le cas parabolique. Cette augmentation de la densité de courant est estimée à 42.31% pour une largeur  $L \approx 1.5$  cm et de l'ordre de 40.35% pour  $L \approx 0.5$  cm. Ceci est dû au fait que la non-parabolicité provoque une augmentation de la densité de seuil et par conséquent une augmentation de la densité de courant.

D'autre part, les deux cas parabolique et non-parabolique présentent une variation linéaire et inversement proportionnelle à L. La densité de courant de seuil est plus faible pour  $L \approx 1.5$ cm, elle est estimée à  $18.5A/cm^2$  en tenant compte de la non-parabolicité et à  $13A/cm^2$  pour le cas parabolique.

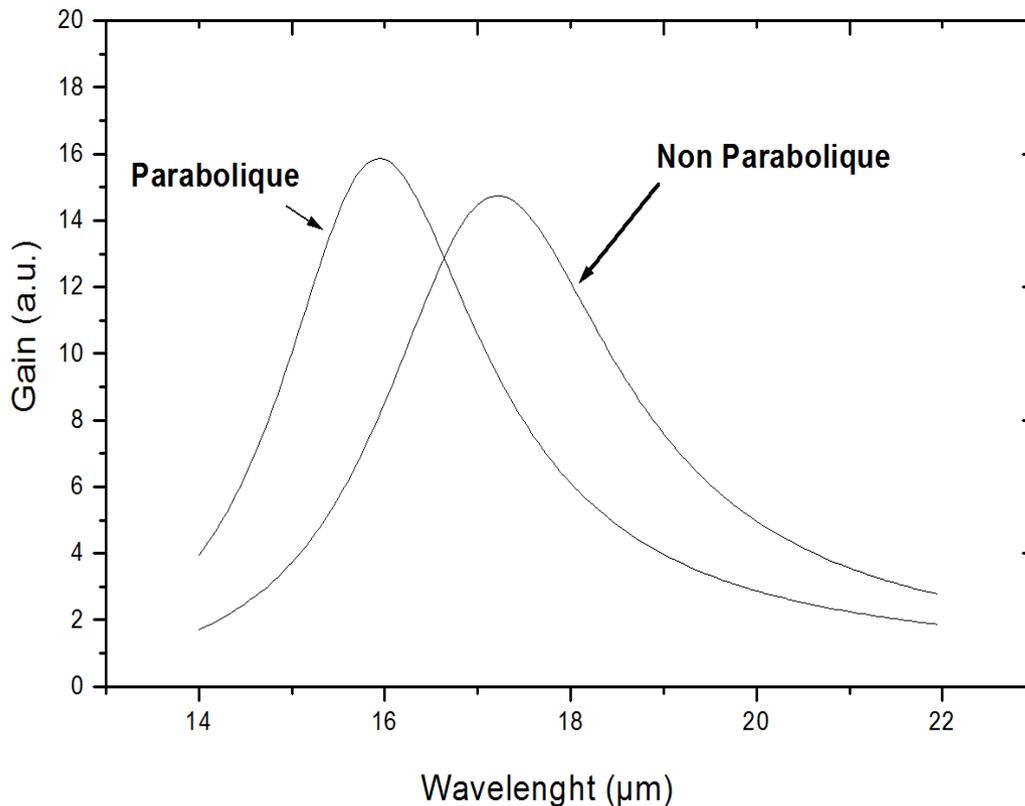


**Figure IV.10 :** Variation de la densité de courant de seuil en fonction de l'inverse de la largeur de la cavité

#### IV.5.4. Gain du laser

Le gain optique du laser pour le cas parabolique et non-parabolique est calculé en fonction de la longueur d'onde d'émission. Le calcul est illustré suivant la figure IV.11. La non-parabolicité provoque une augmentation de la longueur d'onde d'émission mais une diminution de l'ordre de 8% du gain non-parabolique.





**Figure IV.11** : Gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentrations de porteurs injectés.

## IV.6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons réalisé une étude d'optimisation de la structure laser à cascade quantique à base du système  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$  (quaternaire/quinaire).

Nous avons optimisé la structure de telle manière à avoir :

- ✓ les bonnes compositions du puits et de barrière, pour avoir : un bon confinement de porteurs et une faible contrainte.
- ✓ la bonne géométrie ; les bonnes épaisseurs des puits et des barrières

Ceci impose: l'utilisation d'un alliage quaternaire  $Ga_{0.70}In_{0.30}As_{0.05}Sb_{0.95}$  pour le puits et un quinaire  $Al_{0.70}Ga_{0.50}In_{0.10}As_{0.10}Sb_{0.90}$  pour la barrière. Cette hétérostructure permet d'avoir un confinement de porteurs de l'ordre  $\Delta E_c = 0.597$  eV et une contrainte de compression de l'ordre :  $\Delta a/a = 1.3\%$ . Ceci provoque l'effet de non-parabolicité qui influe sur les paramètres de fonctionnement du LCQ.

Nous avons montré que la non-parabolicité a deux effets opposés sur le laser. Le premier effet est désirable correspond à l'augmentation de la longueur d'onde d'émission du fait que notre but est d'atteindre la gamme la plus large possible. Cette augmentation de la longueur d'onde se traduit par un décalage vers le rouge (redshift). Cependant ce résultat est compensé par l'effet indésirable qui correspond à l'augmentation du courant de seuil et diminution du gain. Ceci provient de l'effet de non-parabolicité sur les principaux paramètres fondamentaux du laser tels que : la masse effective, les énergies de confinement, la force d'oscillateur et le temps de transit. Au chapitre suivant, nous étudions l'influence de la contrainte et de la non-parabolicité sur les principaux paramètres des lasers.

## Références

- [1] Carlo Sirtori, GaAs Quantum Cascade Lasers: Fundamentals and Performance, Thales Research and Technology, EDP Sciences (2002).
- [2] R.F. Kazarinov and R.A. Suris. Sov. Phys. Semicond., **5** :707, (1971).
- [3] J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, A.L. Hutchinson, and A.Y. Cho., Quantum Cascade Laser. Science, **264**: 553, (1994).
- [4] O. Cathabard, R. Teissier, J. Devenson, J. C. Moreno, and A. N. Baranov, Applied Physics Letters **96**, 141110 (2010).
- [5] D. Chastanet, G. Lollia, A. Bousseksou, M. Bahriz, P. Laffaille, A. N. Baranov, F. Julien, R. Colombelli, R. Teissier, Applied Physics Letters, **104**, 021106 (2014)
- [6] Christoph Walther, Milan Fischer, Giacomo Scalari, Romain Terazzi, Nicolas Hoyler, and Jérôme Faist., Applied Physics Letters, **91**, 131122, (2007).
- [7] Claire Gmachl, Federico Capasso, Alessandro Tredicucci, Deborah L. Sivco, Rudeger Kohler, Albert L. Hutchinson, and Alfred Y. Cho, IEEE JOURNAL OF Selected Topics In Quantum Electronics, VOL. **5**, NO.3, MAY/ JUNE, (1999).
- [8] Andrea Edelmann, Caterina Ruzicka, Johannes Frank, Bernhard Lendl, Werner Schrenk , Erich Gornik , Gottfried Strasser, Journal of Chromatography A, **934**, 123–128, (2001).
- [9] D. Clery, “Sensing: Terahertz on a chip”, Science **297**(5582), 763, (2002).
- [10] Jérôme Faist, Intersubband Optoelectronics, ETH Zurich, September **17**, (2009).
- [11] M. Helm. The basic physics of intersubband transitions. In H.C. Liu and F. Capasso, editors, Intersubband transitions in quantum wells: Physics and device applications I, volume **62**, chapter 1, pages 1-99, Academic Press, (2000).
- [12] L.C. West and S.J. Eglash., Appl. Phys. Lett., **46**(12):1156-1158, (1985).
- [13] A. Yariv, Quantum electronics, John Wiley and Sons, New-York, (1989).

- [14] Carlo Sirtori and Rolland Teissier, “Quantum Cascade Lasers: Overview of Basic principles of operation and state of the art” in intersubband transition in quantum structure, Roberto Paiella, **15**, editor MC Graw-Hill new York, (2006).
- [15] Claire Gmachl, Federico Capasso, Deborah L Sivco and Alfred Y Cho., Institute Of Physics Publishing, Rep. Prog. Phys., 64, 1533–1601, (2001).
- [16] R. Ferreira and G. Bastard, Phys. Rev. B, 40(2), 1074–1086, Jul (1989).
- [17] Jérôme Faist, Daniel Hofstetter, Mattias Beck, Thierry Aellen, Michel Rochat, and Stéphane Blaser, IEEE Journal of Quantum Electronics, VOL. **38**, N<sup>o</sup> 6, (2002).
- [18] Qi Jie Wang, Christian Pflügl, Laurent Diehl, Federico Capasso, Tadataka Edamura, Shinichi Furuta, Masamichi Yamanishi, and Hirofumi Kan, Applied Physics Letters, **94**, 011103, (2009).
- [19] B. Gelmont, V.B. Gorfinkel, and S. Luryi, Appl. Phys. Lett., vol.**68**, pp.2171-2173, (1996)
- [20] Vera B. Gorfinkel, Serge Luryi, Fellow, and Boris Gelmont, IEEE Journal of Quantum Electronics, vol.**32**, N<sup>o</sup>.11, (1996).

## Chapitre V :

### **Étude comparative des Effets de la non-parabolicité sur les propriétés des lasers de type I et de type II**

V.1. Introduction .....	102
V.2. Modèle $k.P$ basé sur l’Hamiltonien [8x8] de Luttinger-Kohn.....	103
V.3. Formalisme de Pikus-Bir .....	105
V.4. Masse effective non-parabolique de conduction .....	106
V.5. Masse effective non-parabolique de valence .....	107
V.6. Application aux lasers de type I à base de $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ .....	107
V.6.1. Masses effectives non-paraboliques de conduction et de valence .....	107
V.6.2. Influence de la concentration en arsenic sur les masses effectives .....	109
V.6.3. Influence de la non-parabolicité sur le gain max .....	111
V.7. Application aux LCQ à base de $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ .....	114
V.7.1. Effet de contrainte et de non-parabolicité sur la masse effective de conduction.....	114
V.7.2. Effet de contrainte et de non-parabolicité sur la force d’oscillateur.....	117
V.7.3. Effet de contrainte et de non-parabolicité sur le temps de transit.....	119
V.7.4. Effet de contrainte et de non-parabolicité sur le gain optique .....	121
V.8. Conclusion .....	123

Clicours.COM

## V.1. Introduction

Dans ce travail, nous étudions les lasers à semi-conducteur à base des antimoniures. Ces matériaux sont caractérisés par un faible gap qui se traduit par toute une série d'effets qui influent sur les propriétés du laser. Ces effets sont :

- forte interaction inter-bandes : entre bandes de conduction et bandes de valence (band mixing) ;
- la nonparabolicité ;
- la contrainte due au désaccord de maille entre les couches semi-conductrices.

L'effet de la non-parabolicité provient d'une part du couplage de la fonction d'onde de la bande de conduction avec celle de la bande de valence et d'autre part, il provient de la contrainte qui résulte du désaccord en maille entre les couches semi-conductrices. Ceci influe fortement sur les paramètres fondamentaux du laser tels que : les masses effectives, les énergies de confinement, les durées de vie des porteurs, la force d'oscillateur et le gain optique du laser.

Dans ce contexte, nous allons utiliser la théorie de la fonction enveloppe [1]. Ce modèle est basé sur l'Hamiltonien [8x8] de Luttinger-Kohn [2] combiné avec le formalisme de Pikus-Bir [3] afin de prendre en compte tous les effets du confinement quantique : contrainte, le mélange de bande (band mixing), et la non-parabolicité.

Dans ce chapitre, nous montrons une influence importante de la contrainte et de la non-parabolicité d'une part sur les paramètres du laser de type I à puits quantique et d'autre part sur les propriétés du laser à cascade quantique à base  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$ .

## V.2. Modèle kp basée sur l'hamiltonien [8\*8] de Luttinger-Kohn

L'Hamiltonien matricielle [8x8] pour les semi-conducteurs de structure cubique est défini par les bases suivantes [2]:

$$\begin{aligned}
 |u_1\rangle &= i|S \uparrow\rangle, \quad \Gamma_6, \\
 |u_2\rangle &= i|S \downarrow\rangle, \quad \Gamma_6, \\
 |u_3\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}}(|X \uparrow\rangle + i|Y \uparrow\rangle), \quad \Gamma_8, \\
 |u_4\rangle &= \frac{i}{\sqrt{6}}(|X \downarrow\rangle + i|Y \downarrow\rangle) - i\sqrt{\frac{2}{3}}|Z \uparrow\rangle, \quad \Gamma_8, \\
 |u_5\rangle &= \frac{i}{\sqrt{6}}(|X \uparrow\rangle - i|Y \uparrow\rangle) + i\sqrt{\frac{2}{3}}|Z \downarrow\rangle, \quad \Gamma_8 \\
 |u_6\rangle &= \frac{i}{2}(|X \downarrow\rangle - i|Y \downarrow\rangle), \quad \Gamma_8 \\
 |u_7\rangle &= \frac{i}{\sqrt{3}}(|X \downarrow\rangle + i|Y \downarrow\rangle) + |Z \uparrow\rangle, \quad \Gamma_7 \\
 |u_8\rangle &= -\frac{i}{\sqrt{3}}(|X \uparrow\rangle - i|Y \uparrow\rangle) - |Z \downarrow\rangle, \quad \Gamma_7
 \end{aligned} \tag{V.1}$$

Tel que  $|S\rangle$  caractérise les états  $s$  de la bande de conduction,  $|X\rangle|Y\rangle$  et  $|Z\rangle$  correspondent aux états  $p$  de la bande valence. Dans ces bases, l'Hamiltonien [8x8] du semi-conducteur bulk est donné comme suit :

$$H_0 = \begin{vmatrix}
 A & 0 & -i\sqrt{3}P & -\sqrt{2}P_z & -iP_- & 0 & -iP_z & -\sqrt{2}P_- \\
 A & 0 & P_+ & -i\sqrt{2}P_z & \sqrt{3}P_- & -i\sqrt{2}P_+ & P_z & \\
 & -P-Q & iL & M & 0 & -L/\sqrt{2} & -i\sqrt{2}M & \\
 & & -P-Q & 0 & M & i\sqrt{2}Q & -\sqrt{\frac{3}{2}}L & \\
 & & & -P+Q & -iL & -\sqrt{\frac{3}{2}}L^* & i\sqrt{2}Q & \\
 & & & & -P-Q & -i\sqrt{2}M^* & -L^*/\sqrt{2} & \\
 & & & & & Z & 0 & \\
 & & & & & & Z & 
 \end{vmatrix} \tag{V.2}$$

Où :

$$A = E_C + \gamma_C \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \quad (\text{V.3})$$

$$P = E_V + \gamma_1 \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \quad (\text{V.4})$$

$$Q = \gamma_2 \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \quad (\text{V.5})$$

$$Z = E_V - \Delta + \gamma_1 \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \quad (\text{V.6})$$

$$P_z = \frac{1}{\sqrt{3}} i\hbar \sqrt{\frac{E_P}{2m_0}} k_z, \quad (\text{V.7})$$

$$P_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{6}} i\hbar \sqrt{\frac{E_P}{2m_0}} (k_x \pm ik_y), \quad (\text{V.8})$$

$$L = \sqrt{3}\gamma_3 \frac{\hbar^2}{m_0} k_z (k_x \pm ik_y), \quad (\text{V.9})$$

$$M = -\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} [\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3 k_x k_y] \quad (\text{V.10})$$

Tel que :  $E_C$  et  $E_V$  sont respectivement les énergies de la bande de conduction et de la bande de valence,  $\Delta_0$  est l'énergie du couplage spin-orbit,  $k_x$ ,  $k_y$  et  $k_z$  sont les vecteurs d'onde suivant  $x$ ,  $y$  et  $z$  respectivement.  $E_P$  est le paramètre de mixing de bande (mélange de bande de conduction avec la bande de valence), il est déterminé par :

$$E_P = \frac{2m_0 P^2}{\hbar^2} \quad (\text{V.11})$$

La masse effective de conduction  $m_e^*$  peut être exprimée comme suit :

$$\gamma_C = \frac{1}{m_C} = \frac{1}{m_C^*} - \left( \frac{E_P}{3} \right) \left[ \frac{2}{E_g} + \frac{1}{(E_g + \Delta_{SO})} \right] \quad (\text{V.12})$$

Les paramètres de Luttinger modifiés s'expriment en fonction des paramètres de Luttinger  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  et  $\gamma_3$  tel que :

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \gamma_1^L - E_P / (3E_g), \\ \gamma_2 &= \gamma_2^L - E_P / (6E_g), \\ \gamma_3 &= \gamma_3^L - E_P / (6E_g). \end{aligned} \quad (\text{V.13})$$

### V.3. Formalisme de Pikus-Bir

La contrainte entre les semi-conducteurs provoque des modifications importantes sur la structure de bande d'énergie, conduisant à plusieurs effets tels que la levée de dégénérescence de la bande de valence. L'effet de la contrainte est pris en compte via l'hamiltonien de Bir-Pikus ( $H_S$ ) qui est donnée comme suit [3] :

$$H_S = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & -p-q & il & m & 0 & -l/\sqrt{2} & -i\sqrt{2}m \\ & & & -p-q & 0 & m & i\sqrt{2}q & -\sqrt{\frac{3}{2}}l \\ & & & & -p+q & -iL & -\sqrt{\frac{3}{2}}l^* & i\sqrt{2}q \\ & & & & & -p-q & -i\sqrt{2}m^* & -l^*/\sqrt{2} \\ & & & & & & z & 0 \\ & & & & & & & z \end{pmatrix} \quad (V.14)$$

Où

$$a = a_C (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (V.15)$$

$$p = -a_V (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (V.16)$$

$$q = -\frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (V.17)$$

$$p = -a_V (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (V.18)$$

$$z = a_V (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (V.19)$$

$$l = d_V (i\varepsilon_{yz} - \varepsilon_{xz}), \quad (V.20)$$

$$m = -\frac{\sqrt{3}b}{2} (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - id_V \varepsilon_{xy} \quad (V.21)$$

$\varepsilon_{ij}$  sont les éléments du tenseur de contrainte,  $a_C, a_V, b$  et  $d_V$  caractérisent les potentiels de déformation.

Dans le plan [001], les éléments du tenseur du potentiel de déformation s'expriment de la manière suivante :

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_{\text{substrat}} - a_{\text{matériau}}}{a_{\text{substrat}}} = \varepsilon, \quad (\text{V.22})$$

$$\varepsilon_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \varepsilon, \quad (\text{V.23})$$

$$\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = 0 \quad (\text{V.24})$$

Tel que :  $a_{\text{substrat}}$  et  $a_{\text{matériau}}$  sont les paramètres de maille du substrat et du matériau respectivement.  $C_{11}$  et  $C_{12}$  sont les constantes d'élasticité.

#### V.4. Masse effective non-parabolique de conduction

La masse effective non-parabolique de la bande de conduction du puits  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  s'exprime de la manière suivante [4] :

$$m_c(\Delta E) = m_{c0} + \frac{E_g + E_H - E_U + 2\Delta E}{E_g} \quad (\text{V.25})$$

Tel que :

$m_{c0}$  : masse effective de conduction en l'absence de contrainte.

$E_g$  : énergie de la bande interdite (gap).

$$E_H = 2a \left[ \frac{C_{11} - C_{12}}{C_{11}} \right] \varepsilon_{//} \quad (\text{V.26})$$

$$E_U = -b \left[ \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11}} \right] \varepsilon_{//} \quad (\text{V.27})$$

Avec  $a$  et  $b$  sont les paramètres correspondant aux potentiels de déformation hydrostatique et de contrainte de cisaillement,  $C_{11}$  et  $C_{12}$  sont les constantes d'élasticité du puits quantique contraint,  $\varepsilon_{//}$  est le tenseur de contrainte dû au désaccord de maille entre le puits et la barrière ; qui est donné par :  $\Delta a/a = (ab - ap)/ab$  avec  $ab$  et  $ap$  sont les paramètres de maille de la barrière et du puits respectivement.  $\Delta E$  est l'énergie mesurée au bord de la bande de conduction. Dans nos calculs, on considère  $\Delta E = 0$ , puisqu'on s'intéresse aux valeurs des masses effectives sous contrainte au centre de la zone de Brillouin.

### V.5. Masse effective non-parabolique de valence

La masse effective non-parabolique de la bande de valence correspond à la masse effective des trous lourds  $m_{hh1}$  qui est donnée par [4] :

$$\left[ \frac{m_{vt}}{m_0} \right]^{-1} = \gamma_1 + \gamma_2 \frac{3\gamma_3^2}{\gamma_2 + \delta\gamma_{a-}} + 3(\gamma_1 - 2\gamma_2 - 4\delta\gamma_{a-}) \left( \frac{\gamma_3}{\gamma_2 + \delta\gamma_{a-}} \right)^2 \frac{1 + \cos(k + L)}{(k + L) \sin(k + L)} \quad (V.30)$$

Où  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  et  $\gamma_3$  sont des paramètres de Luttinger.

$$k + L = [\{\gamma_1 - 2\gamma_2 - 4\delta\gamma_{a-}\} / (\gamma_1 + 2\gamma_2)]^{1/2} \pi \quad (V.31)$$

$$\delta\gamma_{a-} = \frac{2E_U}{\frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \frac{2\pi}{L} \right)^2} \quad (V.32)$$

Avec  $\hbar$ ,  $L$ ,  $m_0$  sont respectivement la constante de Planck, la largeur du puits, et la masse effective en l'absence de contrainte.

### V.6. Applications aux lasers de type I à base de $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$ .

Dans les précédents travaux, nous avons étudié, en se basant sur la théorie  $kp$ , l'influence des effets de contrainte, de non-parabolicité et de mixing de bandes sur les paramètres de fonctionnement du laser de type I à puits quantique à base d'alliages quaternaires [5,6]. Dans cette partie, nous étudions ces effets sur les propriétés du laser inter-bande à puits quantique de type I à base du système quinaire  $\text{Ga}_{0.35}\text{In}_{0.65}\text{As}_{0.32}\text{Sb}_{0.68}/\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.50}\text{In}_{0.25}\text{As}_{0.24}\text{Sb}_{0.76}$ .

#### V.6.1. Masse effectives non paraboliques de conduction et de valence

Sur la figure V.1.3 et V.1.4, nous représentons les variations des masses effectives de conduction et de valence en fonction de la largeur du puits  $Lz$  pour le modèle parabolique et le modèle non-parabolique respectivement.

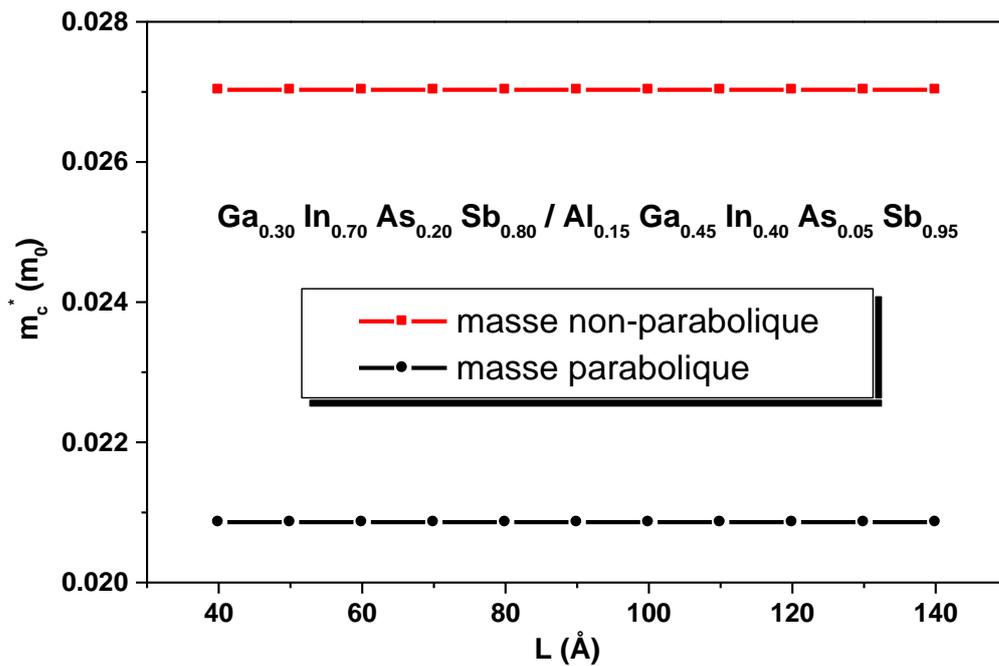


Figure V.1 : Variation de la masse effective de conduction en fonction de la largeur du puits  $Lz$  pour  $\text{Ga}_{0.30}\text{In}_{0.70}\text{As}_{0.20}\text{Sb}_{0.80}/\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.45}\text{In}_{0.40}\text{As}_{0.05}\text{Sb}_{0.95}$

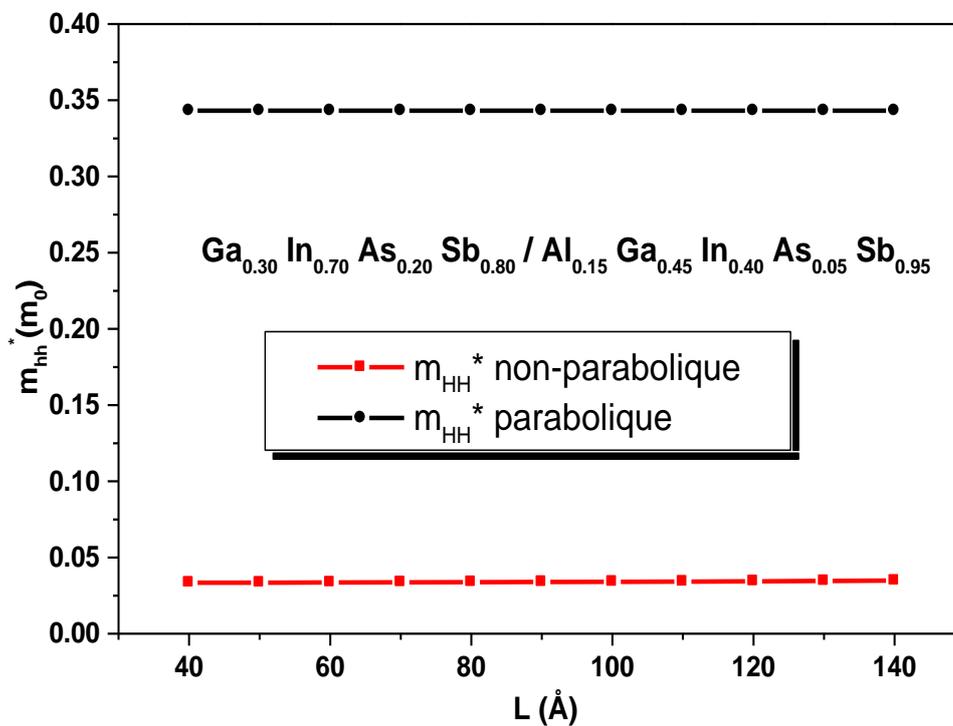


Figure V.2 : Variation de la masse effective de valence en fonction de la largeur du puits  $Lz$  pour  $\text{Ga}_{0.30}\text{In}_{0.70}\text{As}_{0.20}\text{Sb}_{0.80}/\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.45}\text{In}_{0.40}\text{As}_{0.05}\text{Sb}_{0.95}$

La figure V.1, montre que la non-parabolicité et la contrainte hydrostatique de compression affecte les énergies de la bande de conduction et elle provoque une augmentation de l'ordre de 30% de la masse effective de l'électron. Par contre, la combinaison de l'effet de la contrainte, l'anisotropie ainsi que le chevauchement des bandes (band-mixing) affecte les états de la bande de valence et conduit à une diminution importante 90% de la masse effective des trous lourds  $HH_1^*$  (figure V.2). Ces effets résultent une augmentation importante du gain optique du laser et diminution de la densité de courant de seuil du laser. Nous rappelons l'expression du gain optique en fonction des masses effectives de conduction et de valence [4] :

$$g(h\nu) = \frac{n_r}{2c_0} \frac{\pi}{\varepsilon_0 h\nu} \left[ \frac{e}{m_0} \right]^2 \left| \frac{m_0 P}{\hbar} \right|^2 \int_0^\infty \frac{m_r}{\hbar^2 \pi L_z} [f_c(E) - f_v(E)] L(h\nu, E) dE \quad (V.33)$$

$$\frac{1}{m_r(E)} = \frac{1}{m_c(E)} + \frac{1}{m_v(E)} \quad (V.34)$$

À partir de la relation du gain, on remarque que le gain optique dépend nettement des masses effectives de conduction et des trous dans la bande de valence via la masse réduite  $m_r^*$ . Dans la partie suivante, nous allons étudier l'influence de la concentration en As sur les masses effective de conduction, de valence  $m_{HH}^*$  et sur la masse réduite.

### V.6.2. Influence de la concentration en arsenic sur les masses effectives:

Nous étudions la variation des masses effectives de conduction  $m_c^*$ , de valence et la masse réduite  $m_r^*$  en fonction de la concentration en As de l'hétérostructure  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_ySb_{1-y}/Al_{0.15}Ga_{0.45}In_{0.40}As_{0.05}Sb_{0.95}$ , tel que  $0 \leq y(As) \leq 0.30$ . Dans ce domaine de concentration, le matériau présente une contrainte bi-axiale de compression et la masse effective de valence correspond à la masse effective des trous lourd  $m_{HH}^*$

Sur les figures V.3 et V.4, nous montrons les variations des masses effectives  $m_c^*$ ,  $m_{HH}^*$  et  $m_r^*$ .

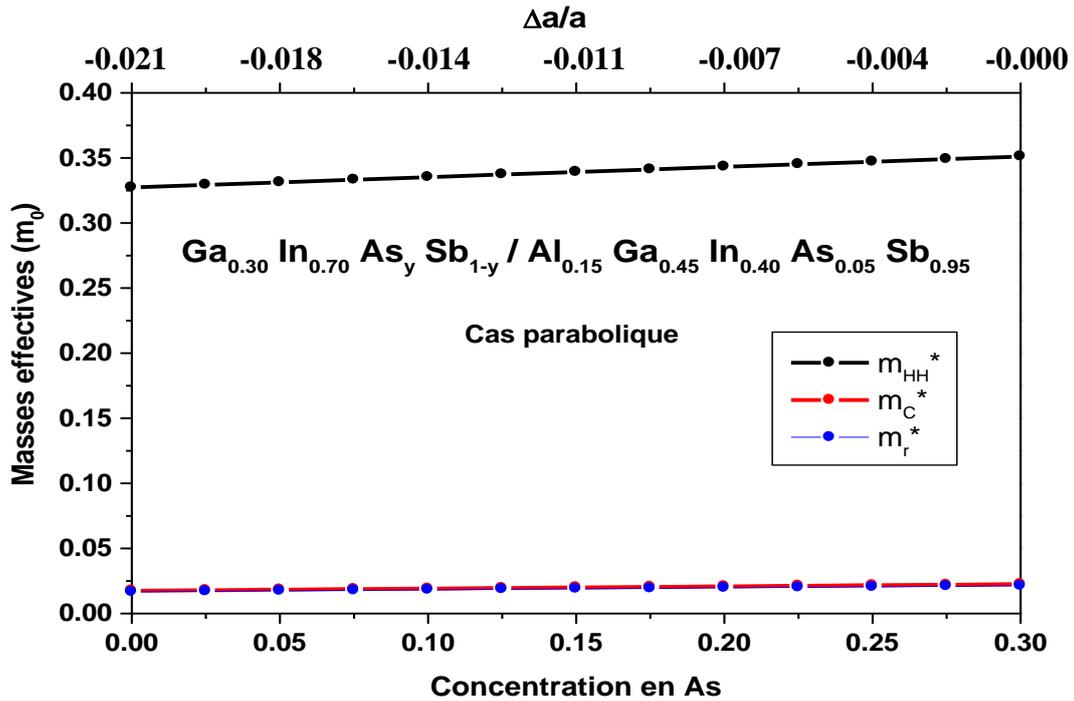


Figure V.3: Variation des masses effectives paraboliques  $m_C^*$ ,  $m_{HH}^*$  et  $m_r^*$  en fonction de la concentration en arsenic  $0 \leq y \leq 0.30$  pour l'hétérostructure  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_ySb_{1-y}/Al_{0.15}Ga_{0.45}In_{0.40}As_{0.05}Sb_{0.95}$

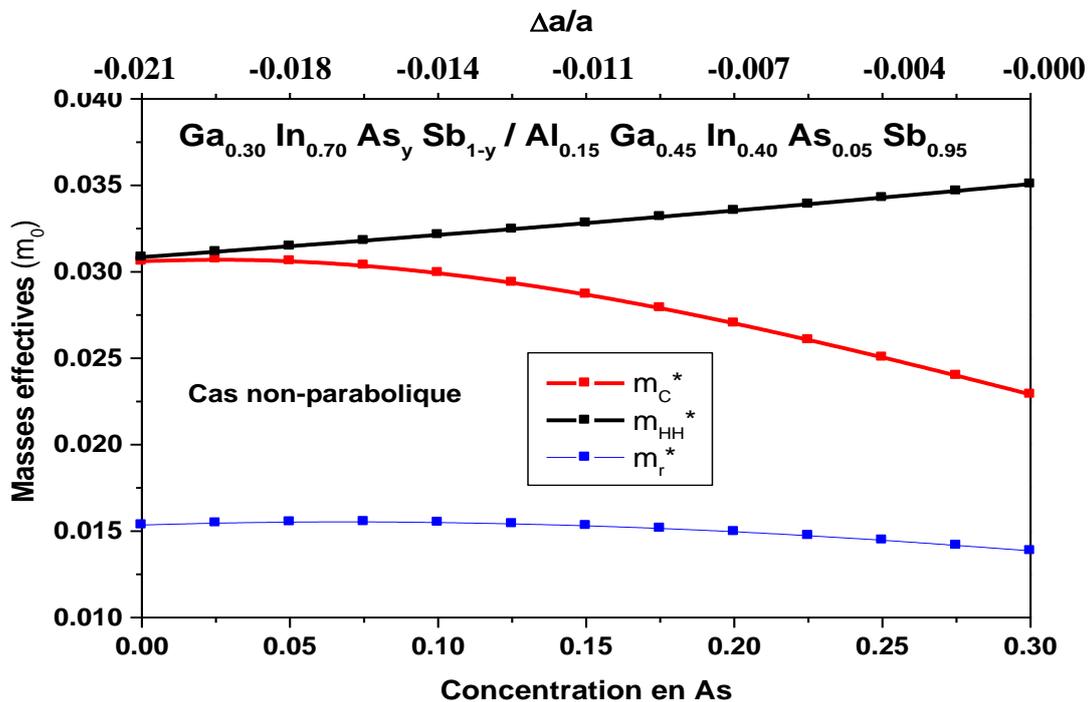


Figure V.4 : Variation des masses effectives non-paraboliques  $m_C^*$ ,  $m_{HH}^*$  et  $m_r^*$  en fonction de la concentration en arsenic  $0 \leq y \leq 0.30$  pour l'hétérostructure  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_ySb_{1-y}/Al_{0.15}Ga_{0.45}In_{0.40}As_{0.05}Sb_{0.95}$

### V.6.3. Influence de la non-parabolicité sur le gain max

Le gain max dépend des masses effectives des électrons et des trous via cette équation [7] :

$$g_{Max} = \alpha_{2d} (1 - e^{-n_s/n_c} - e^{-n_s/R_{C,V} n_c}) \quad (V.35)$$

Où  $\alpha_{2d}$  est l'absorption du milieu à  $J=0$ ,  $(n_s/n_c)$  est la densité surfacique réduite de porteurs,  $n_c$  est la densité critique bidimensionnelle de conduction et  $n_s$  est la densité bidimensionnelle des porteurs.  $R_{C,V}$  : est le rapport des masses effectives des porteurs de la bande de conduction et de la bande de valence, tel que:  $R_{C,V} = m_{HH}/m_C$ .

L'équation V.35 indique que le gain maximal est positif lorsqu'on atteint la condition du seuil de transparence [7] :

$$e^{-n_s/n_c} + e^{-n_s/R_{C,V} n_c} = 1 \quad (V.36)$$

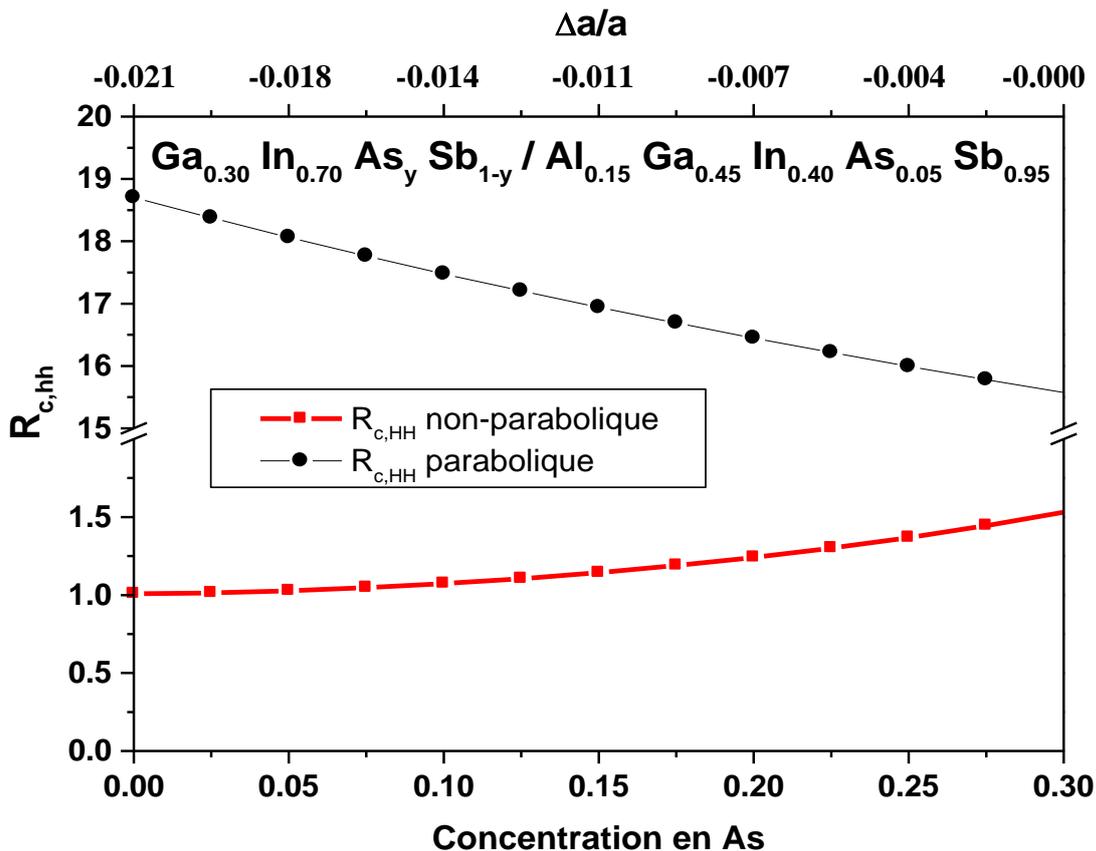
La densité de transparence dépend nettement du rapport  $R_{C,V}$ . La condition V.36 est réalisée quand on a un rapport  $R_{C,V}$  qui tend vers 1 i.e. les valeurs des masses effectives des électrons et des trous doivent être proches.

Sur la figure V.5, nous montrons la variation du rapport  $R_{CV}$  en fonction de la concentration en arsenic dans l'hétéro-structure  $\text{Ga}_{0,30}\text{In}_{0,70}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,45}\text{In}_{0,40}\text{As}_{0,05}\text{Sb}_{0,95}$  et en fonction de la contrainte, pour les cas parabolique et non-parabolique

Pour le cas parabolique montré sur la figure V. 5, le rapport  $R_{C,HH}$  augmente avec la diminution de la concentration en As dans le domaine  $0 \leq y \leq 0.30$ . Dans ce domaine de composition, le matériau présente une contrainte bi-axiale de compression qui provoque avec la diminution de la concentration en As, une augmentation de l'énergie du gap, augmentation des énergies de confinement et augmentation des masses effectives. Il en résulte une augmentation du rapport  $R_{C,HH}$ . Cependant, pour le cas non-parabolique, le rapport  $R_{C,HH}$  diminue avec la diminution de la concentration en arsenic de  $y=0.30$  à  $y=0$ . Dans ce cas, nous avons les effets de contrainte, de mixing de

bandes et de non-parabolicité qui provoquent une augmentation de la masse effective de conduction et une diminution importante de la masse effective des trous lourds  $m_{HH}^*$ . Il s'ensuit donc, une diminution du rapport  $R_{C,HH}$  non-parabolique.

En comparant les valeurs des rapports paraboliques avec celles non-paraboliques :  $R_{C,HH}$  parabolique varie entre :  $R_{C,HH} = 17.76$  pour  $y = 0.075$  (valeur correspondante à un maximum de contrainte) à  $R_{C,HH} = 15.57$  pour  $y=0.30$  (valeur correspondante à structure non-contraint). Par contre,  $R_{C,HH}$  non-parabolique prends des valeurs autours de 1 pour  $0 \leq y \leq 0.23$  et il varie entre  $R_{C,HH} = 1.05$  pour  $y = 0.075$  (valeur correspondante à un maximum de contrainte) à  $R_{C,HH} = 1.53$  pour  $y=0.30$  (valeur correspondante à structure non-contraint). Ce résultat indique que les effets de contrainte, de non-parabolicité et de mixing de bande ont une importante influence sur les paramètres de fonctionnement du laser : longueur d'onde, gain et densité de courant seuil laser. Dans la partie suivante, nous allons évaluer cette influence sur le gain max du laser.



**Figure V.5 :** Variation du rapport  $R_{C,HH}$  en fonction de la concentration en arsenic pour les cas parabolique et non-parabolique en fonction de la concentration en arsenic  $0 \leq y \leq 0.30$  pour l'hétérostructure  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_ySb_{1-y}/Al_{0.15}Ga_{0.45}In_{0.40}As_{0.05}Sb_{0.95}$

Sur la figure V.6, nous montrons la variation du rapport ( $g_{Max}/\alpha_{2d}$ ) en fonction de la densité surfacique réduite ( $n_s/n_c$ ) pour les cas parabolique et non-parabolique.

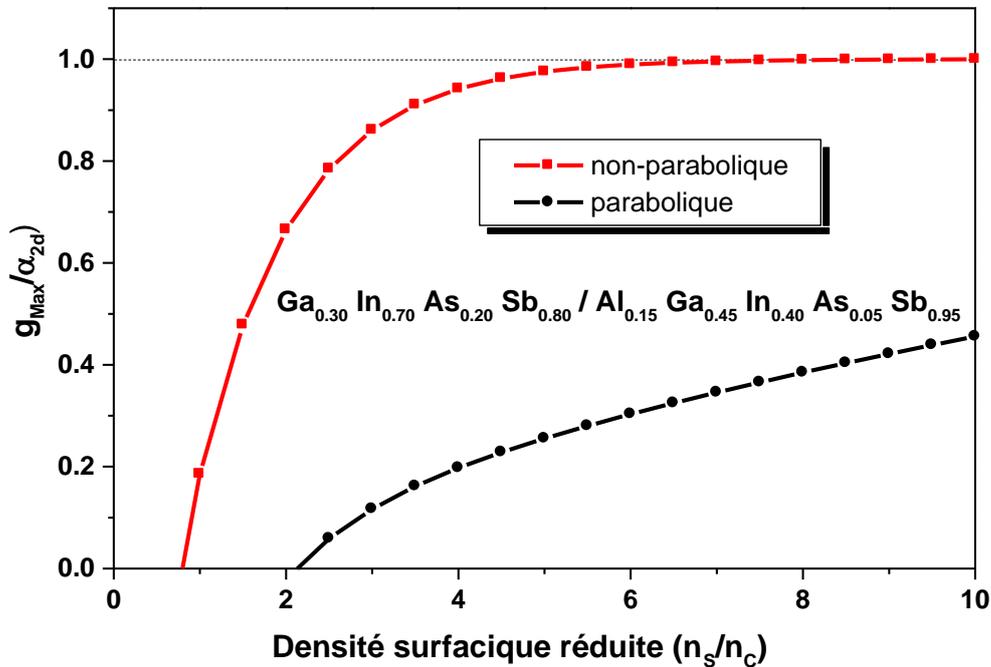


Figure V.6 : Gain normalisé à l'absorption  $\alpha_{2d}$  en fonction de la densité critique bidimensionnelle de porteurs  $n_c$

Cette variation montre clairement que la condition de transparence est atteinte pour le cas non-parabolique. Le gain max non-parabolique augmente rapidement et il se sature. Ceci provient du fait que le rapport des masses effectives  $R_{C,HH}$  qui tend vers 1 sous l'effet de la non-parabolicité. Ce résultat indique que les effets de contrainte, de non-parabolicité et de mixing de bandes tendent la valeur de la masse effective de l'électron dans la bande de conduction vers la valeur de la masse effective des trous lourds dans la bande de valence. Il s'ensuit donc un rapport  $R_{C,HH}$  qui tend vers 1 et on atteint ainsi la condition de transparence.

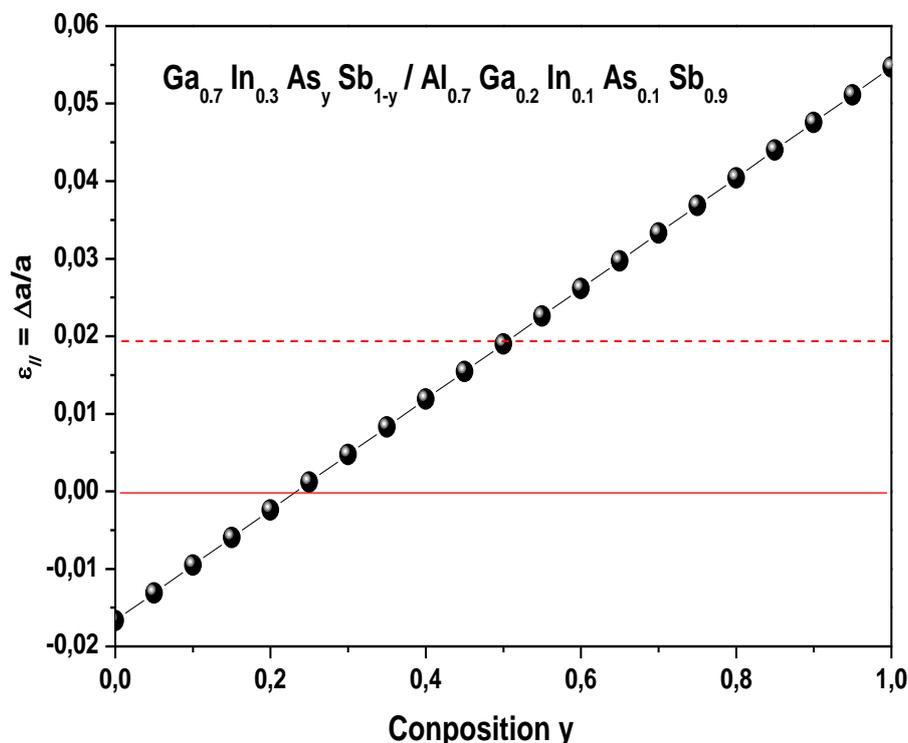
## V.7. Applications aux lasers à cascade quantique à base de $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$ .

Dans cette partie, nous étudions l'effet de contrainte et de non-parabolicité sur : la masse effective de conduction, la force d'oscillateur, le temps de transit et sur le gain optique du laser à cascade quantique à base du système  $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.2}\text{In}_{0.1}\text{As}_{0.1}\text{Sb}_{0.9}$ .

### V.7.1. Effet de contrainte et de non-parabolicité sur la masse effective de conduction

#### ➤ Contrainte:

Pour éviter l'évolution des defaults à l'interface et la détérioration du matériau, le désaccord de maille entre les semi-conducteurs contraints est limité à une valeur critique :  $\Delta a/a \leq \pm 2\%$ . Sur la figure V. 7, nous montrons la variation de  $\Delta a/a$  en fonction de la composition en As dans l'hétéro-structure  $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.2}\text{In}_{0.1}\text{As}_{0.1}\text{Sb}_{0.9}$ .



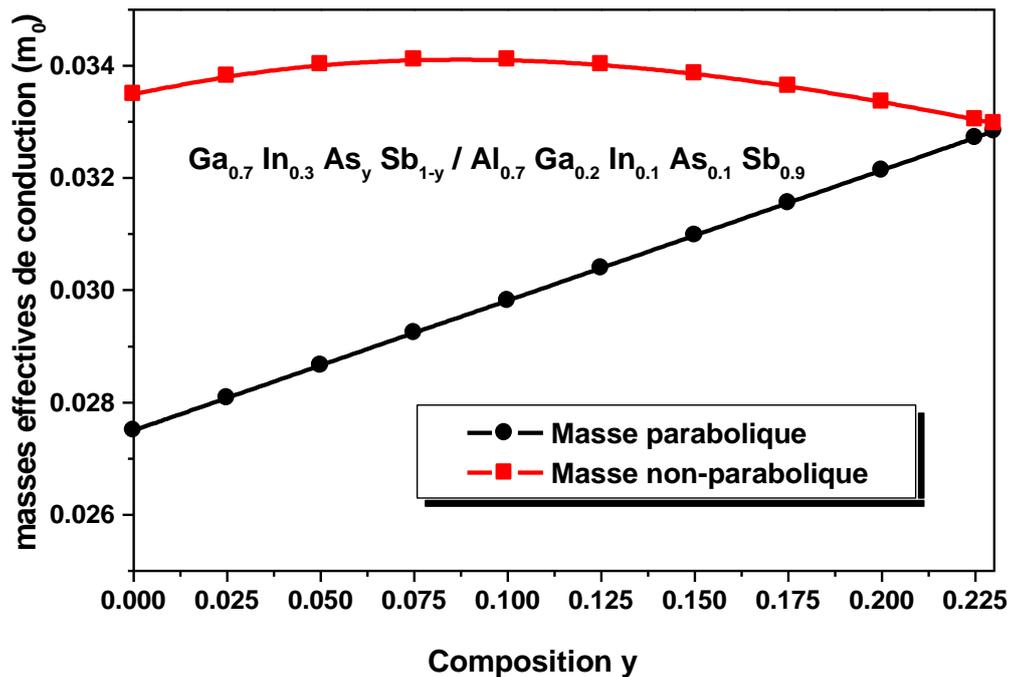
**Figure V.7 :** Variation de  $\varepsilon_{//} = \Delta a/a$  en fonction de la composition en As dans l'hétéro-structure  $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.2}\text{In}_{0.1}\text{As}_{0.1}\text{Sb}_{0.9}$ .

La figure V.7, montre que la condition du désaccord de maille  $\Delta a/a < \pm 2\%$  limite le domaine de concentration en As dans le puits quantique  $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  à  $0.00 \leq y \leq 0.50$ . Ces résultats sont obtenus en fixant adéquatement les concentrations d'alliage dans la barrière  $\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.2}\text{In}_{0.1}\text{As}_{0.1}\text{Sb}_{0.9}$  et en fixant la concentration en In dans le puits quantique  $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ . Ce choix de l'hétéro-structure  $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.2}\text{In}_{0.1}\text{As}_{0.1}\text{Sb}_{0.9}$  pour le laser à cascade quantique est déterminé de telle manière à obtenir un confinement suffisant des électrons et une compatibilité suffisante entre le puits quantique et la barrière.

D'après la figure V.7, on remarque que pour l'hétéro-structure  $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.2}\text{In}_{0.1}\text{As}_{0.1}\text{Sb}_{0.9}$ , la contrainte dépend de la concentration en As et présente trois régions: pour les faibles concentrations en As  $0.00 \leq y \leq 0.23$ , le puits quantique  $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  est sous-compression bi-axiale; à  $y=0.23$ , le puits quantique  $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  est accordé en maille avec la barrière  $\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.2}\text{In}_{0.1}\text{As}_{0.1}\text{Sb}_{0.9}$ ; et pour les fortes concentrations en As, le puits quantique présente une contrainte bi-axiale de tension.

➤ Non-parabolicité:

Sur la figure V.8, nous montrons les calculs effectués sur la masse effective de conduction pour les modèles parabolique et non-parabolique, exécutés pour l'hétéro-structure  $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.2}\text{In}_{0.1}\text{As}_{0.1}\text{Sb}_{0.9}$ , en fonction de la composition en arsenic dans l'alliage  $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ , tel que  $0 \leq y(\text{As}) \leq 0.23$ . Dans ce domaine de concentration en As, on remarque que pour  $y=0.23$ , les modèles parabolique et non-parabolique donnent la même valeur de la masse effective  $m^*/m_0=0.324$ . Ceci est dû au fait que pour cette valeur de concentration en As ( $y=0.2$ ), le puits quantique est accordé en maille avec la barrière donc le matériau n'est pas contraint et par conséquent, il n'y a pas l'effet de mixing de bande et de non-parabolicité. Par contre, quand la concentration en As diminue de la valeur  $y=0.23$ , les deux modèles présentent des comportements assez différents pour la variation de la masse effective en fonction de la concentration en As.



**Figure V.8 :** Variation de la masse effective de conduction en fonction de la concentration en As dans les cas parabolique et non-parabolique [8]

Pour le cas parabolique montré sur la figure V. 8 par des cercles noirs, la masse effective diminue linéairement avec la diminution de la concentration en As dans le puits quantique. Cette diminution de la masse effective est estimée à 17.6% pour un rapport des masses de la structure sous-compression maximale à  $y=0$  avec la structure non-contraint à  $y=0.23$

Cependant, pour le cas non-parabolique montré sur la figure V. 6 par des carrés rouges, la masse effective augmente d'une façon monotone et linéaire avec la diminution de la concentration en As jusqu'à  $y \approx 0.12$  environ et après elle se sature en passant par une valeur maximale de la masse  $m^*/m_0=0.340$  à  $y \approx 0.11$  puis elle diminue en diminuant la concentration en As jusqu'à  $m^*/m_0=0.328$  à  $y=0$ . Ce résultat indique que le comportement de la masse effective en fonction de la composition en As est dû à l'interaction de deux comportements opposés. D'une part, la composante hydrostatique de la contrainte bi-axiale de compression provoque une augmentation de l'énergie du gap et par conséquent une augmentation de la masse effective de l'électron. D'autre part, les effets de mélange des états de conduction et de valence dus

à l'interaction  $kP$  ainsi que de la nature anisotrope de la contrainte bi-axiale conduit à une diminution de l'énergie  $E_G$  qui à son tour induit une diminution de la masse effective de l'électron au bas de la bande de conduction. À des valeurs de  $y$  plus proches de la valeur correspondante à l'accord en maille  $0,11 \leq y \leq 0,23$ , c'est le premier comportement qui domine car, les effets de mélange de bandes ne sont pas importants. Par contre, à  $0,00 \leq y \leq 0,11$ , l'anisotropie de la contrainte devient importante ce qui induit l'effet de mixing de bande provoquant une réduction de l'énergie  $E_G$  et par conséquent une diminution de la masse effective de l'électron.

En effet, la masse effective non-parabolique de conduction est toujours plus grande que celle parabolique dans toute la gamme de composition d'alliage. Elle atteint une augmentation maximale d'environ 22 % à  $y = 0$  par rapport à la masse effective parabolique. L'augmentation de la masse effective provoque une diminution des énergies de confinement dans le puits quantique. Cet effet combiné avec les effets de mixing de bandes et d'interaction  $kP$  induit une réduction de l'énergie de transition laser qui se traduit par une augmentation de la longueur d'onde du LCQ et un décalage vers le rouge (redshift).

### V.7.2. Effet de contrainte et de non-parabolicité sur la force d'oscillateur

La force d'oscillateur est un paramètre important pour le gain du LCQ. En fait, l'émission laser est atteinte quand on atteint la condition du seuil. Ceci est achevé par deux possibilités:

1. En augmentant l'inversion de population, c.-à-d. quand la différence entre le niveau initial et le niveau final de la transition laser atteint une valeur critique. Ceci est déterminé par l'égalité entre le gain optique et les pertes.
2. Maximiser la force d'oscillateur.

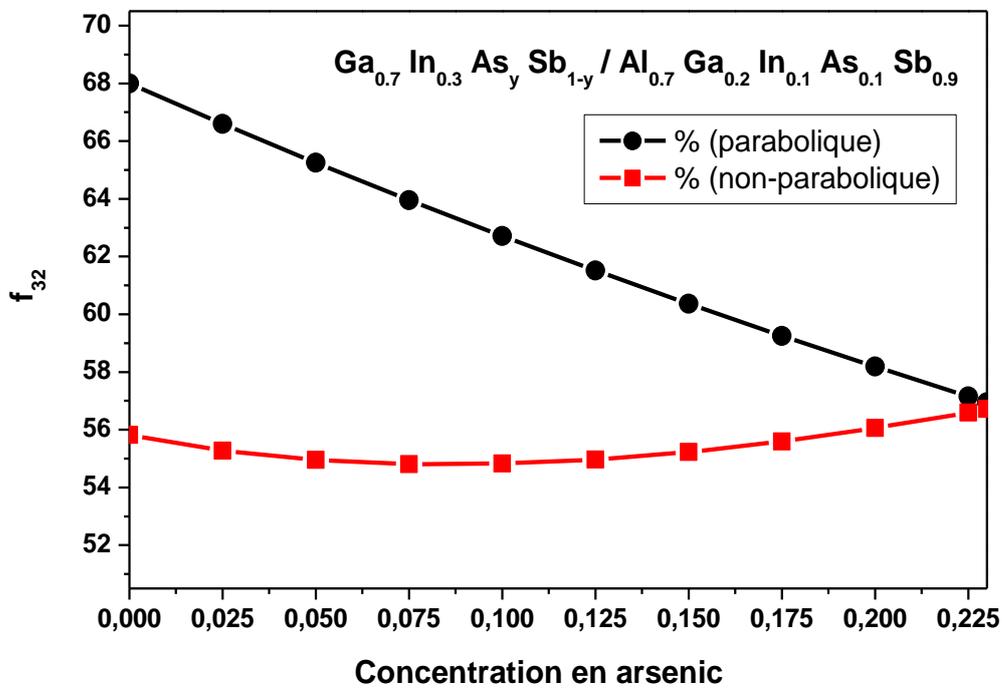
Dans cette partie, nous étudions l'influence de la contrainte et de la non-parabolicité sur la force d'oscillateur pour la transition inter-sous-bande  $E_3 \rightarrow E_2$  (transition  $3 \rightarrow 2$ ). La force d'oscillateur pour une transition d'un état initial (i) à un état final (j) est proportionnelle au carré de l'élément de matrice dipolaire et elle dépend que de la masse effective [9]:

$$f_{ij} = \frac{2m_0(E_j - E_i)|Z_{ij}|^2}{\hbar^2} \tag{V.37}$$

Pour la transition 3→2, l'équation V.33 peut être simplifiée par [10]:

$$f_{32} \approx 1.87 \frac{m_0}{m^*} \tag{V.38}$$

La force d'oscillateur est inversement proportionnelle à la masse effective. Sur la figure V.9, nous montrons les calculs effectués sur la variation de la force d'oscillateur parabolique et non-parabolique pour la transition inter-sous-bande 3→2 du laser à cascade quantique à base de Ga<sub>0.7</sub>In<sub>0.3</sub>As<sub>y</sub>Sb<sub>1-y</sub>/Al<sub>0.7</sub>Ga<sub>0.2</sub>In<sub>0.1</sub>As<sub>0.1</sub>Sb<sub>0.9</sub>



**Figure V.9 :** Variation de la force d'oscillateur en fonction de la composition en arsenic  $0 \leq y(As) \leq 0.2$  pour l'hétérostructure Ga<sub>0.70</sub>In<sub>0.30</sub>As<sub>y</sub>Sb<sub>1-y</sub>/Al<sub>0.70</sub>Ga<sub>0.50</sub>In<sub>0.10</sub>As<sub>0.10</sub>Sb<sub>0.90</sub> [8]

La figure V. 9, montre que la force d'oscillateur non-parabolique est réduite par rapport à la force d'oscillateur parabolique. Cette diminution est estimée à 20% à y = 0% en As dans l'alliage Ga<sub>0.7</sub>In<sub>0.3</sub>As<sub>y</sub>Sb<sub>1-y</sub>. Etant donné que le gain est proportionnel au produit de la force d'oscillateur et l'inversion de population donc, une faible force

d'oscillateur induit une réduction du gain optique du laser. Donc, pour augmenter le gain optique, on doit augmenter l'inversion de population.

D'autre part, la force d'oscillateur non-parabolique diminue légèrement avec l'augmentation de la concentration en As dans le domaine  $0 \leq y(\text{As}) \leq 0.23$  et elle reste presque constante quand la concentration en As est diminuée de  $y=0.23$  (structure accordé en maille) à  $y=0$  (structure sous-contrainte maximale). Par conséquent, il est très intéressant d'évaluer l'influence effective de la réduction de la force d'oscillateur non-parabolique sur tous les paramètres du laser.

### V.7.3. Effet de contrainte et de non-parabolicité sur le temps de transit

Dans cette partie, nous étudions l'influence de la non-parabolicité sur le temps de transit. Les temps de transit parabolique et non parabolique sont calculées à partir de l'équation V.2.1 et V.2.2 respectivement [11].

$$\tau_g = \hbar \left( \frac{1}{2E\alpha_0} - \frac{1}{2(E-V_0)\alpha_B} \right) \frac{1+\delta^2}{4\delta|g|^2} \sinh(2\kappa L) - \frac{\hbar}{2(E-V_0)} \frac{\Delta}{|g|^2} \frac{2\alpha_B-1}{\alpha_B} \kappa L \quad (\text{V.39})$$

$$\tau_{np} = \frac{\hbar}{2(E-V_0)} \frac{\alpha_B-1}{\alpha_B} \left( \frac{1+\delta^2}{4\delta|g|^2} \sinh(2\kappa L) - \frac{\Delta}{|g|^2} \kappa L \right) \quad (\text{V.40})$$

Tel que :  $\delta = m_B^*(E)/m_0^*(E) \cdot k/\kappa$ ,  $\Delta = (1 - \delta^2)/(2\delta)$ ,  $\kappa^2 = 2m_B^*(E)/\hbar^2(V_0 - E)$ ,  $g = \cosh(\kappa L) + i\Delta \sinh(\kappa L)$ .

L est la largeur de la barrière  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{In}_{1-x-y}\text{As}_y\text{Sb}_{1-z}$ .

Dans ce modèle, on considère que la barrière est rectangulaire ( $V(z) = V_0$ ). La non-parabolicité est prise en compte via cette équation [10]:

$$m(E) = m^* \left( 1 + \frac{E - V(z)}{E_g(z)} \right) \quad (\text{V.41})$$

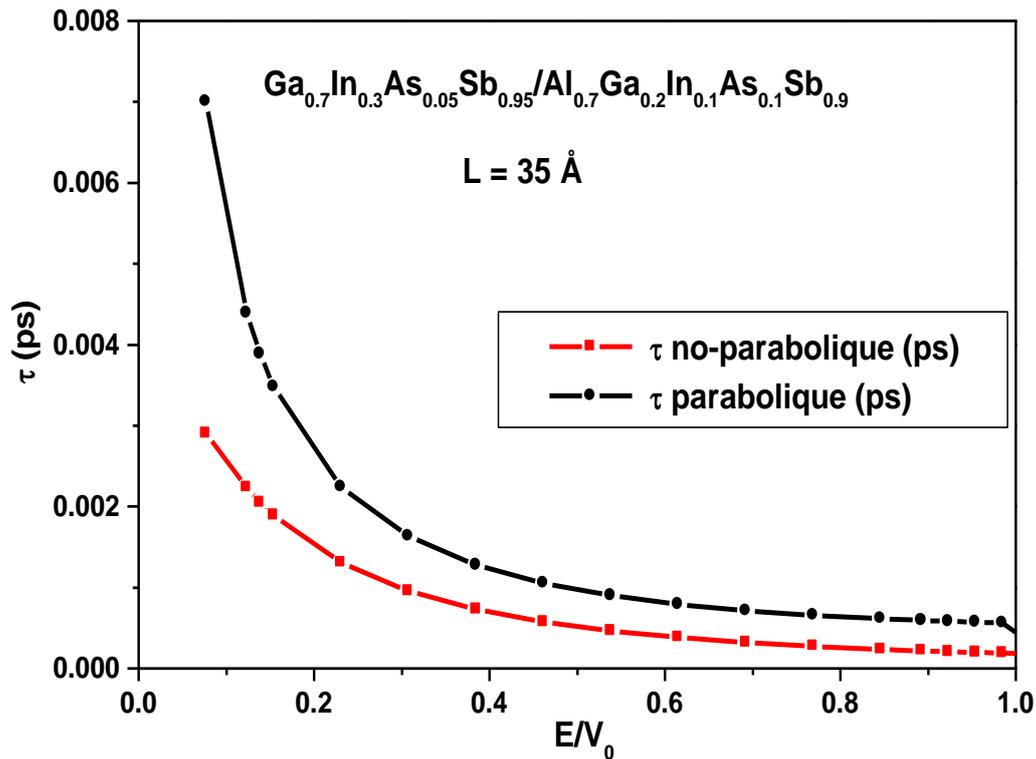
Les masses effectives du puits  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  et de la barrière  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$  sont respectivement:

$$m_0(E) = m_0^* (1 + E/E_g^0) = m_0^* \alpha_0 \quad (\text{V.42})$$

$$m_B(E) = m_B^* (1 + (E - V)_0/E_g^B) = m_B^* \alpha_B \quad (\text{V.43})$$

Tel que:  $m_0^*$ ,  $m_B^*$ ,  $E_g^0$  and  $E_g^B$  sont les masses effectives et les énergies du gap  $E_g$  à l'intérieur et à l'extérieur de la barrière respectivement.

Les calculs effectués sur le temps de transit pour l'hétéro-structure  $Ga_{0.7}In_{0.3}As_{0.05}Sb_{0.95}/Al_{0.7}Ga_{0.2}In_{0.1}As_{0.1}Sb_{0.95}$  d'une seule barrière à largeur  $L = 35 \text{ \AA}$ , sont représentés suivant la figure V.10.



**Figure V.10** : Variation du temps de transit de l'électron incident en fonction de  $E/V$  pour l'hétérostructure  $Ga_{0.70}In_{0.30}As_{0.05}Sb_{0.95}/Al_{0.70}Ga_{0.50}In_{0.10}As_{0.10}Sb_{0.90}$  avec une largeur de barrière  $L = 35 \text{ \AA}$  [8]

Sur la figure V.10, on remarque que le temps de transit non-parabolique est toujours inférieur à celui du modèle parabolique. Ceci est particulièrement le cas des faibles énergies de  $E/V_0$  où le temps de transit non-parabolique est deux fois plus faible que celui du modèle parabolique, et cet effet reste considérable pour les plus grandes énergies de  $E/V_0$ . Ce résultat pour le cas non-parabolique est très intéressant du fait qu'il amène l'injection des électrons à travers l'injecteur du laser plus rapide que pour le cas parabolique.

Le temps de transit est un paramètre critique pour les lasers à cascade quantique et il a une relation directe avec plusieurs paramètres du LCQ. Un court temps de transit se traduit par une inversion de population qui est rapide, augmentation du temps de réponse, la fréquence de pulsation augmente et la puissance du laser est améliorée. Ceci suppose que l'effet de l'augmentation de la masse effective non-parabolique et la diminution de la force d'oscillateur peut être compensé par la réduction du temps de transit de l'électron. Pour cela, nous allons évaluer dans la partie suivante, cette influence sur le gain optique du laser.

#### V.7.4. Effet de contrainte et de non-parabolicité sur le gain optique

Dans cette partie, nous étudions l'effet de contrainte et de non-parabolicité sur le gain optique du laser à cascade quantique. Dans ce contexte, nous utilisons l'équation suivante pour le gain optique [10]:

$$g = \frac{4\pi e}{\varepsilon_0 n \lambda 2\gamma L_p} |z_{32}|^2 \tau_3 = \frac{2e}{\varepsilon_0 n c \hbar} \frac{1}{2\gamma L_p} E_{32} \tau_3 |z_{32}|^2 \quad (\text{V.44})$$

$$g = \frac{e\hbar}{\varepsilon_0 c m_0} \frac{1}{2\gamma n L_p} f_{32} \tau_3 \quad (\text{V.45})$$

Où  $e$ ,  $\varepsilon_0$ ,  $n$ , et  $\lambda$ , sont la charge d'électron, la permittivité du vide, l'indice de réfraction et la longueur d'onde, respectivement;  $L_p$  est la largeur d'une période de la zone active;  $c$  and  $\hbar$  sont la vitesse de la lumière dans le vide et la constant de Planck, respectivement;  $|z_{32}|^2$  est l'élément de matrice dipolaire au carré et  $\tau_3$  est la durée de vie de l'état excité. À partir de l'équation V.40, on remarque clairement que la non-parabolicité à une influence directe sur le gain optique via la masse effective d'électron sur trois paramètres: l'énergie de transition  $E_{32}$ , l'élément de matrice dipolaire au carré  $|z_{32}|^2$  et la durée de vie  $\tau_3$  de l'état excité.

Étant donné que l'énergie de transition  $E_{32}$  et le carré de l'élément de matrice dipolaire  $|z_{32}|^2$  sont inversement proportionnelles à la masse effective et la durée de vie de l'état excité  $\tau_3$  dépend de l'inverse de la racine de la masse effective, par conséquent, la

Clicours.COM

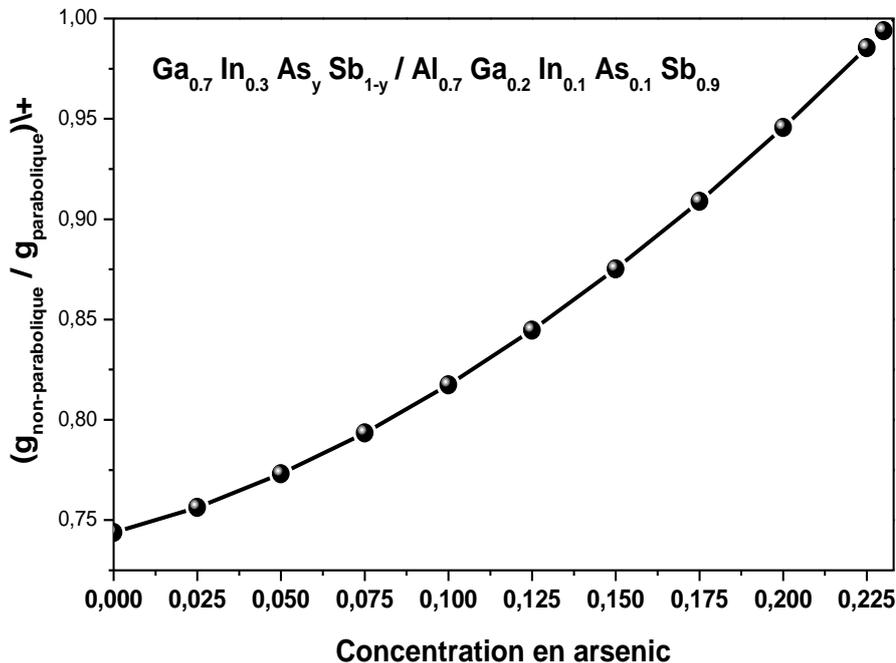
variation du gain optique en fonction de la masse effective peut être simplifiée comme suit [12]:

$$g \propto E_{21} \tau_2 |z_{21}|^2 \propto (m^*)^{-3/2} \tag{V.46}$$

À partir de cette équation, le gain optique est proportionnel à  $(m^*)^{-3/2}$ . Ce qui signifie qu'une augmentation de la masse effective induit une diminution importante du gain optique. Afin de comparer le cas non-parabolique au parabolique, on définit le rapport de leur gain optique comme suit:

$$\frac{g_{non-parabolic}}{g_{parabolic}} = \left( \frac{m_{parabolic}^*}{m_{non-parabolic}^*} \right)^{3/2} \tag{V.47}$$

Sur la figure V.11, nous montrons ce rapport de gain en fonction de la concentration en As dans le domaine de concentration  $0.00 \leq y \leq 0.23$ .



**Figure V.11:** Variation du rapport du gain optique ( $g_{non-parabolique}/g_{parabolique}$ ) du LCQ en fonction de la concentration en As dans l'hétéro-structure  $Ga_{0.7}In_{0.3}As_ySb_{1-y}$  [8]

Cette figure montre que le rapport ( $g_{\text{non-parabolique}}/g_{\text{parabolique}}$ ) est égale à 1 pour  $y=0.23$  (accord en maille) et il diminue avec la diminution de la concentration en As jusqu'à une valeur minimale de l'ordre de 0.75 à  $y=0$  (contrainte maximale). Ce résultat montre clairement que les effets de contrainte bi-axiale de compression due au désaccord de maille, le mélange des bandes (mixing de bande), et l'effet de non-parabolicité ont une influence néfaste sur les paramètres du laser et principalement sur le gain optique du LCQ.

## V.8. Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons procédé à une étude comparative de contrainte et de non-parabolicité sur les propriétés des lasers à transition inter-bande de type I à puits quantiques et des lasers intra-bande à cascade quantique à base d'hétéro-structure  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$ .

Nous avons montré que les effets de contrainte, de non-parabolicité et de mixing de bande influent fortement sur les paramètres de fonctionnement des lasers.

Pour le laser inter-bande, ces effets sont très prometteurs du fait qu'ils provoquent une augmentation de la masse effective de conduction et une diminution importante de la masse effective des trous lourds dans la bande de valence. Il en résulte, une diminution de la densité de courant de seuil laser et augmentation du gain optique. Cependant, ce résultat est compensé par la diminution de la longueur d'onde d'émission qui est dû à l'augmentation importante du gap non-parabolique. Il en résulte un décalage vers les courtes longueurs d'onde qui se traduit par un décalage vers le bleu (blueshift).

Pour le laser intra-bande à cascade quantique, les effets de contrainte, de non-parabolicité et de mixing de bande provoquent des effets aussi bien indésirables que bénéfiques sur les paramètres de fonctionnement du laser, à cause principalement de l'augmentation de la masse effective de l'électron. Les effets souhaitables

correspondent à la diminution de l'énergie de transition laser et la diminution du temps de transit. La diminution de l'énergie de transition laser est désirable du fait que notre challenge est d'atteindre la gamme la plus large possible de longueurs d'onde et dans ce cas  $\lambda \approx 17 \mu\text{m}$ . La diminution du temps de transit se traduit par toute une série d'effets souhaitables tel que : atteinte rapide de l'inversion de population, augmentation du temps de réponse, augmentation de la fréquence de pulsation et augmentation de la puissance du laser.

L'augmentation de la masse effective des électrons est également intéressante car elle augmente la densité d'états des niveaux d'énergie de transition d'émission laser, et, surtout, le niveau excité  $E_3$  où l'inversion de population a lieu. Cependant, ces effets sont malheureusement compensés par des effets très néfastes tels que la diminution importante de la force d'oscillateur et par conséquent une diminution du gain optique.

Donc, pour les hétérostructures du LCQ à multi-puits quantiques à base de  $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y} / \text{Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.2}\text{In}_{0.1}\text{As}_{0.1}\text{Sb}_{0.9}$ , un optimum peut être trouvé seulement pour les fortes concentrations en As et plus proche de la condition de l'accord en maille, c'est-à-dire pour des valeurs proches de  $y = 0,23$ , afin d'éviter les effets de contraintes et de non-parabolicité sur les paramètres du LCQ.

## Références

---

- [1] A. Kadri, K. Zitouni, Y. Rouillard, P. Christol Springer Series in Physics **119**, p. 135, (2008)
- [2] J.M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869–883 (1955)
- [3] G.L. Bir, G.E. Pikus, Symmetry and Strain Induced Effects in Semiconductors, Wiley, New York, 1974.
- [4] Ikuo Suemune, IEEE Journal of Quantum Electronics, vol. **27**, 5 (1991)
- [5] K. Zitouni, A. Kadri, P. Christol, A. Joullié, Institute of physics Conference Series No187, Narrow Gap Semiconductors 2005, edited by J. Kono and J. Léotin, pp. 351-356, (2005).
- [6] A. Kadri, K. Zitouni, Y. Rouillard, P. Christol, Springer Proceedings in Physics No119, Narrow Gap Semiconductors 2007, edited by B. Murdin and S. Clowes, pp. 135-138, (2007).
- [7] E. Rosencher and B. Vinter, Optoélectronique, ed. Masson. 1998, Paris: Masson.
- [8] N. Boukli-Hacène, K. Zitouni, A. Kadri, Superlattices and Microstructures **72**, 25–34, (2014).
- [9] M. Helm, The basic physics of intersubband transitions. In H.C. Liu and F. Capasso, editors, Intersubband transitions in quantum wells: Physics and device applications I, volume **62**, chapter 1, pages 1-99, Academic Press, 2000.
- [10] L.C. West and S.J. Eglash., Appl. Phys. Lett., **46**(12):1156-1158, (1985).
- [10] S.Lj.S. Kocinac, V. Milanovic, Z. Ikonic, D. Indjin, Phys. Letters A **366**, 130, (2007).
- [11] Carlo Sirtori and Rolland Teissier, “Quantum Cascade Lasers: Overview of Basic principles of operation and state of the art” in intersubband transition in quantum structure, Roberto Paiella, **15**, editor MC Graw-Hill new York, (2006).

## Conclusion générale

---

Dans ce travail, nous avons réalisé une étude théorique comparative entre les lasers inter-bandes à puits quantiques de type I et les lasers inter-sous-bandes à cascade quantique à base de matériaux Antimoniures de semi-conducteurs III-Sb pour applications dans le domaine du moyen infrarouge (MIR) et dans le Tétra-Hertz (THz).

Au chapitre I, nous avons étudié les propriétés structurales et électroniques des différents alliages à base d'antimoniures. Nous avons montré que l'utilisation de l'alliage quinaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}_z\text{Sb}_{1-z}$  pour la barrière avec le puits  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  permet d'améliorer les performances des lasers tels que le confinement des porteurs. Donc, le courant de fuite diminue, il en résulte un accroissement important du gain et diminution de courant de seuil.

Au chapitre II, nous avons procédé à une étude d'optimisation de structures lasers à puits quantiques de type I à base d'hétérostructure Arséniures d'Antimoniures quaternaires/quinaires :  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ . Nous avons ainsi déterminé que la longueur d'onde maximale est de  $\lambda = 3.1\mu m$  pour une structure à puits quantique de type I à base de  $Ga_{0.30}In_{0.70}As_{0.20}Sb_{0.80}/Al_{0.15}Ga_{0.45}In_{0.40}As_{0.05}Sb_{0.95}$  avec une densité de courant de seuil laser  $0.083kA/cm^2$ .

Au chapitre III, nous avons procédé à une étude d'optimisation d'un autre type de laser basé sur les hétérostructures de type I à base de matériaux dilués nitrures d'antimoniures  $Ga_{1-x}In_xN_ySb_{1-y}/Al_xGa_{1-x}N_ySb_{1-y}$ . Nous avons déterminé la structure optimale du laser avec une concentration maximale en azote  $y = 2\%$  dans le puits  $Ga_xIn_{1-x}N_ySb_{1-y}$ . La plus grande longueur d'onde obtenue est de  $\lambda = 4\mu m$  pour une structure à puits quantiques de type I à base de  $Ga_{0.9}In_{0.1}N_{0.02}Sb_{0.98}/Al_{0.1}Ga_{0.9}N_{0.01}Sb_{0.99}$  avec un gain modal de l'ordre de  $250\text{ cm}^{-1}$  et un faible courant de seuil de  $0.9\text{ kA/cm}^2$ .

Au chapitre IV, nous avons procédé à une étude d'optimisation d'un laser à cascade quantique (LCQ) basé sur les transitions inter-sous-bandes du système à super-réseaux  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ . Nous avons montré que l'application de la notion de LCQ aux hétérostructures à base d'alliages  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$  permet d'améliorer les performances et le fonctionnement des lasers. La longueur d'onde obtenue est de l'ordre de  $17.1\mu m$ . Nous avons montré que la non-parabolicité provoque un décalage vers les grandes longueurs d'onde qui se traduit par un décalage vers le rouge (redshift).

Au chapitre V, nous avons étudié les effets de contrainte et de non-parabolicité sur les propriétés des lasers. Nous avons montré une influence importante des effets de contrainte et de non-parabolicité d'une part sur les paramètres de fonctionnement des lasers à base de  $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/Al_xGa_yIn_{1-x-y}As_zSb_{1-z}$ . Pour le laser inter-bande, ces effets sont très prometteurs du fait qu'ils provoquent une augmentation de la masse effective de conduction et une diminution importante de la masse effective des trous lourds dans la bande de valence. Il en résulte, une diminution du courant de seuil laser

et augmentation du gain. Cependant ces résultats sont compensés par l'effet non souhaitable qui est la diminution de la longueur d'onde d'émission. La non-parabolicité dans les lasers inter-bandes provoque un décalage vers les petites longueurs d'onde qui se traduit par un blueshift.

Pour le laser intra-bande à cascade quantique, les effets de contrainte, de non-parabolicité et de mixing de bande provoquent des effets aussi bien indésirables que bénéfiques sur les paramètres de fonctionnement du laser, à cause principalement de l'augmentation de la masse effective de l'électron. Il en résulte des effets souhaitables tel que : l'augmentation de la longueur d'onde d'émission  $\lambda \approx 17.1 \mu\text{m}$  et la diminution du temps de transit qui conduit à une augmentation du temps de réponse, augmentation de la fréquence de pulsation et augmentation de la puissance du laser. Cependant, il en résulte également et malheureusement des effets néfastes qui correspondent à une diminution importante de la force d'oscillateur et par conséquent une diminution du gain optique.

En résumant, nous avons étudié deux types distincts de lasers destinés aux applications dans le MIR et le THz.

Les lasers à transition **inter-bandes** sont capables de fonctionner en régime continu à température ambiante mais dans un domaine très étroit en longueurs d'onde :  $2 \leq (\lambda \mu\text{m}) \leq 4$  qui fait que la détection des particules est très limitée. Les lasers à puits quantique de type I à base d'alliages quaternaires et quinaire de l'hétérostructure  $\text{Ga}_{0.30}\text{In}_{0.70}\text{As}_{0.20}\text{Sb}_{0.80} / \text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.45}\text{In}_{0.40}\text{As}_{0.05}\text{Sb}_{0.95}$  sont limités au domaine spectrale  $\lambda \leq 3.1 \mu\text{m}$ . Afin d'améliorer cette longueur d'onde pour les lasers inter-bandes, nous avons proposé les matériaux dilués nitrures d'antimoniures de l'hétérostructure  $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{N}_{0.02}\text{Sb}_{0.98} / \text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}_{0.01}\text{Sb}_{0.99}$ . Avec ce type de matériaux, la longueur d'onde est améliorée mais elle est toujours limitée à  $\lambda \leq 4 \mu\text{m}$ . Ces composants ne sont pas bien adaptés pour donner une très haute résolution et une bonne précision sur la nature des substances à analyser à cause de :

- La longueur d'onde d'émission laser est limitée par l'énergie du gap  $E_G$  ;
- La limite chimique : on ne peut pas travailler dans toute la gamme de concentrations d'alliages ;
- La contrainte entre puits/barrière :  $\Delta a/a$  doit être inférieure à 2% ;
- Transition type I-type II de l'hétérostructure ;
- Fonctionnement limité par la température à cause de l'effet Auger ;

Les lasers à transition **inter-sous-bandes** à cascade quantique (LCQ) sont des sources qui sont capables de produire des rayonnements intenses dans toute la gamme de longueurs d'onde du MIR et THz, ce qui permet de détecter les traces d'une substance sondée (particule par milliard) avec une très grande sensibilité et de bonne précision, car ils présentent plusieurs avantages :

- Longueur d'onde d'émission dépend des épaisseurs des puits et des barrières ;
- On peut travailler avec des hétérostructures de type II ;
- Amplification par le super réseau ;
- Puissance très élevée.

**BOUKLI HACÈNE Nassima**

**Doctorat de Physique,**

**Option: École Doctorale Nanosciences des Matériaux,  
Nanotechnologie, Nano-métrie**

*Intitulé:*

**Étude comparative des lasers inter-bandes et inter-sous-bandes à nanostructures d'Antimoniures de semi-conducteurs III-Sb pour applications MIR et THz**

**Résumé :**

Dans ce travail, nous procédons à une étude théorique comparative des lasers inter-bandes et inter-sous-bandes à nanostructures d'Antimoniures de semi-conducteurs III-Sb pour applications optiques en Moyen Infra-rouge (MIR) et en oscillateurs hyper-fréquences Téra-Hertz (THz).

Ces lasers à semi-conducteurs de la famille des antimoniures présentent un grand potentiel pour divers domaines d'applications: environnementales, industrielles, militaires et biomédicales.

L'objectif de ce travail est d'optimiser les performances de ces types de lasers en termes de Longueur d'onde d'émission Laser, de Gain, de Densité de courant de seuil, de Puissance, ..., en vue des applications dans le domaine MIR et THz.

**Mots clés:** Nanostructures, Antimoniures III-Sb, Nitrures d'Antimoniures III-N-Sb, Quaternaire, Quinaire, Lasers type I, Lasers de type II, Cascade Quantique, MIR, THz.

**Directrice de Thèse : Professeur K. ZITOUNI,**

**Ecole Doctorale Nanosciences des Matériaux, Nanotechnologie, Nano-métrie**

**Laboratoire d'Etude des Matériaux, Optoélectronique et Polymères, LEMOP,**

**Département de Physique      Faculté des Sciences Exactes et Appliquées      Université d'Oran**